

# Numerische Methoden zur Simulation teilchengenerierter elektromagnetischer Felder in der Beschleunigerphysik

Vom Fachbereich 18  
Elektrotechnik und Informationstechnik  
der Technischen Universität Darmstadt

zur Erlangung der Würde  
eines Doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)  
genehmigte Dissertation

von  
Dipl.-Phys. Thomas Lau  
geboren am 14. November 1974 in Burgwedel

Referent:	Prof. Dr.-Ing. Thomas Weiland
Korreferent:	Prof. Dr. Dr. h.c. mult. Achim Richter
Korreferent:	Prof. Dr. Jörg Rossbach

Tag der Einreichung:	29.03.2006
Tag der mündlichen Prüfung:	18.07.2006

D17  
Darmstädter Dissertation

# Numerische Methoden zur Simulation teilchengenerierter elektromagnetischer Felder in der Beschleunigerphysik

Thomas Lau

*D17  
Darmstadt Dissertation*

*14. Januar 2007*

— Diese Arbeit ist meinen Physik- und Mathematiklehrern  
gewidmet —

# INHALTSVERZEICHNIS

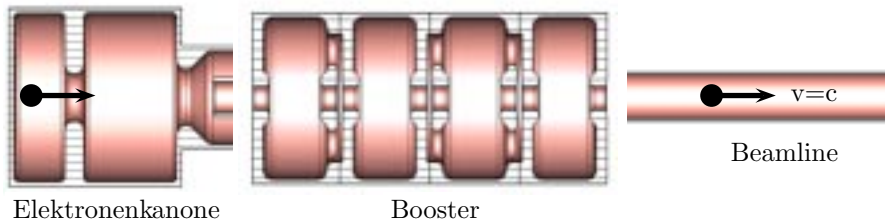
<b>1. Einleitung</b>	1
1.1 Motivation	1
1.2 Inhalt der Arbeit	3
<b>2. Das Mathematische Modell</b>	4
2.1 Vlasov-Gleichung	4
2.2 Maxwellsche Gleichungen	5
<b>3. Räumliche Diskretisierungsverfahren für die Maxwellschen Gleichungen</b>	8
3.1 Methode der Finiten Integration	8
3.1.1 Kartesisches Gitter	8
3.1.2 Gitter-Maxwellgleichungen	9
3.1.3 Materialbeziehungen	11
3.1.4 Formulierung als System gewöhnlicher Differentialgleichungen	11
3.1.5 Semidiskrete Erhaltungssätze	11
3.1.6 Räumliche Stabilität	12
3.2 Finite Volumen Methoden	12
3.2.1 Maxwellschen Gleichungen als Erhaltungssatz	13
3.2.2 Formulierung als System gewöhnlicher Differentialgleichungen	14
3.2.3 Semidiskrete Erhaltungssätze	19
3.2.4 Räumliche Stabilität	20
<b>4. Die Particle-In-Cell-Methode</b>	21
4.1 Numerische Lösung der Vlasov-Gleichung	21
4.2 Initialisierung der Teilchenverteilung	22
4.3 Regularisierung der Teilchenverteilung	23
4.4 Interpolation der Felder	24

<b>5. Zeitintegration der semidiskreten Gleichungen</b>	25
5.1 Konstruktion mittels Taylorreihen	27
5.1.1 Methode der Finiten Integration	28
5.1.2 Finite Volumen Methoden	29
5.2 Konstruktion durch Split-Operator-Verfahren	29
5.2.1 Methode der Finiten Integration	30
5.2.2 Finite Volumen Methoden	33
5.3 Volldiskrete Erhaltungssätze	34
5.3.1 Methode der Finiten Integration	34
5.3.2 Finite Volumen Methoden	36
5.4 Fourieranalyse der Verfahren	37
5.4.1 Methode der Finiten Integration	37
5.4.2 Finite Volumen Methoden	40
5.4.3 Graphische Gegenüberstellung der Dispersionseigenschaften	40
5.5 Stabilität	47
5.5.1 Methode der Finiten Integration	47
5.5.2 Finite Volumen Methoden	50
5.6 Berücksichtigung der Anregung	51
<b>6. Strominterpolationsalgorithmen für die diskreten Kontinuitätsgleichungen</b>	52
6.1 Methode der Finiten Integration	53
6.1.1 Lösung der volldiskreten Kontinuitätsgleichung des Leap-Frog-Verfahrens	53
6.1.2 Lösung der volldiskreten Kontinuitätsgleichung des Split-Operator-Verfahrens in longitudinaler und transversaler Raumrichtung	57
6.1.3 Lösung der volldiskreten Kontinuitätsgleichung des Split-Operator-Verfahrens in drei Raumrichtungen	58
6.2 Finite Volumen Methoden	59
<b>7. Filtern der Ströme und der Felder</b>	60
7.1 Räumliches Filtern des Stroms	61
7.2 Filtern des Verlet-Leap-Frog-Verfahrens	62
<b>8. Validierung und Vergleich der Methoden</b>	64
8.1 Eigenmoden eines Rechteckresonators	64
8.2 Drift eines Bunches von Elektronen	65

<b>9. Anwendung</b> . . . . .	72
<b>10. Zusammenfassung und Ausblick</b> . . . . .	76
10.1 Zusammenfassung . . . . .	76
10.2 Ausblick . . . . .	76
 <b>Anhang</b>	 78
<b>A. Mathematika Notebook</b> . . . . .	79
<b>B. Finite Volumen Methoden</b> . . . . .	81
B.1 Kommutatorbeziehungen . . . . .	81
B.2 Antisymmetrie der $\mathbf{P}_\alpha$ -Operatoren . . . . .	81
B.3 Diskrete Energie . . . . .	81
<b>C. Ergänzungen zur Zeitintegration</b> . . . . .	83
C.1 Stabilitätskriterien . . . . .	83
C.2 Zum Verlet-Leap-Frog-Verfahren . . . . .	84
C.3 Zur Existenz und Konstruktion von erhaltenen Divergenzoperatoren .	85
C.4 Die Bestimmung des optimalen Stabilisierungsparameters für das sta- bilisierte Leap-Frog-Verfahren . . . . .	86
<b>D. Uniforme B-Splines</b> . . . . .	87
<b>E. Fourier-Analyse der TCA-VLF Methode</b> . . . . .	88
<b>F. Abkürzungen und Symbole</b> . . . . .	90

# 1. EINLEITUNG

## 1.1 Motivation



**Abb. 1.1:** Schematische Darstellung der Anfangssectionen die ein Elektronenbunch in einem Linearbeschleuniger durchläuft.

Teilchenbeschleuniger finden vielfach Anwendung in Naturwissenschaft und Technik. In der Teilchenphysik haben Experimente an Elektronen- und Protonenbeschleunigern wesentliche Beiträge zum Verständnis vom Aufbau der Materie geliefert. So wurde unter anderem das Tau-Neutrino erst im Jahr 2000 durch ein Experiment am Tevatron-Beschleuniger nachgewiesen. Mithilfe der durch Teilchenbeschleuniger erzeugten Synchrotronstrahlung, wie z.B. am HASYLAB bei DESY Hamburg und BESSY in Berlin, werden z.B. Strukturuntersuchungen an Molekülen und Oberflächen durchgeführt.

Geplante Projekte, wie der europäische Röntgenlaser XFEL (X-Ray Free-Electron Laser)\* bei DESY Hamburg, ermöglichen die Erzeugung von kohärenten Röntgenstrahlen mit einer Wellenlänge von weniger als einen Nanometer. Für das Einsetzen der selbstverstärkenden spontanen Emission (SASE<sup>†</sup>-Prinzip) sind die an die Qualität des Teilchenstrahles gestellten Anforderungen extrem hoch. Daher ist für die Konstruktion und den Betrieb von Beschleunigern ein theoretisches Verständnis der Dynamik der beschleunigten Teilchen in der jeweiligen Maschine notwendig (siehe Abb. 1.1). Diese, als Strahldynamik bezeichnete, Bewegung der Teilchen kann unter Vernachlässigung von Kollisionen theoretisch durch die Vlasov-Maxwell Gleichungen mit einer Teilchenverteilungsfunktion  $f$  beschrieben werden. Aufgrund der

---

\* Der XFEL produziert Laserlicht, indem er hochenergetische Elektronen auf einem „Slalomkurs“ zwingt.

<sup>†</sup> Die Verstärkung setzt durch im Bunch vorhandenes Schrotrauschen ein [1].

Nichtlinearität dieser Gleichungen sowie der komplizierten Randbedingungen für die elektromagnetischen Felder ist eine geschlossene analytische Lösung unmöglich.

Mithilfe von numerischen Verfahren kann jedoch eine approximative Lösung mit beliebiger Genauigkeit erhalten werden. Damit ist theoretisch das Problem, die Vlasov-Maxwell Gleichungen zu lösen, nach der Auswahl eines konvergenten numerischen Verfahrens gelöst<sup>‡</sup>. Da das Verfahren konvergent ist, existiert zu jeder vorgegebenen Fehlerschranke für die numerische Lösung eine minimale Diskretisierung, ab welcher das Verfahren diese unterschreitet. Für die praktische Anwendung des numerischen Verfahrens spielen neben der Konvergenz noch weitere Aspekte eine wichtige Rolle.

Das numerische Verfahren muss als Algorithmus in einer Programmiersprache unter Berücksichtigung der verfügbaren Ressourcen wie Speicher und Anzahl der maximalen Rechenoperationen pro Zeiteinheit implementiert werden. Folglich sind die Anforderungen an einen numerischen Algorithmus neben der Konvergenz, dass dieser einfach genug zu implementieren ist und in einer akzeptablen Zeit auf dem vorhanden Rechner das Problem innerhalb einer gewissen Fehlerschranke löst.

Die einzige Klasse von numerischen Algorithmen, die eine hinreichend genaue numerische Lösung der vollständigen, sechsdimensionalen Vlasov-Maxwell Gleichungen mit den gegenwärtig zur Verfügung stehenden Computerressourcen erlaubt, sind Particle-In-Cell (PIC)\* Algorithmen. Die Teilchenverteilungsfunktion wird bei diesen Algorithmen durch sogenannte Makroteilchen dargestellt. Die Trajektorien dieser Teilchen liegen auf Charakteristiken der Vlasov-Gleichung und hängen vom elektromagnetischen Feld ab. Die sich bewegenden Makroteilchen stellen ihrerseits einen elektrischen Strom dar und produzieren somit ein eigenes elektromagnetisches Feld mit dem sie in Wechselwirkung treten. Ein PIC Algorithmus kann in zwei Blöcke unterteilt werden: Die numerische Lösung der Trajektorien der Teilchen und die numerische Lösung der Maxwellschen Gleichungen.

Für die numerische Lösung der Maxwellschen Gleichungen in Teilchenbeschleunigern im Rahmen eines PIC Algorithmus stellen sich zwei Probleme. Erstens: In modernen Teilchenbeschleunigern sind die Dimensionen der Teilchenpakete sehr klein im Vergleich zu der sie umgebenden Geometrie. Dies erfordert die feine Diskretisierung eines großen Rechengebietes. Zweitens: Entlang der Strahlachse bewegen sich die Teilchen mit ultrarelativistischer<sup>†</sup> Geschwindigkeit. Aufgrund der Lorentzkontraktion werden alle Wellen entlang dieser Richtung zu einer höheren Frequenz hin verschoben. Daraus resultiert, dass die zu simulierenden elektromagnetischen Felder extrem anisotrop und breitbandig sind. Eine akkurate Simulation solcher Felder

---

<sup>‡</sup> Für eine Diskussion der Existenz von Lösungen der Vlasov-Maxwell Gleichungen und die Konvergenz von Teilchenmethoden sei auf [2] verwiesen.

\* Der Name Particle-In-Cell kommt daher, dass sich Teilchen frei innerhalb des aus Zellen bestehenden Rechengitters bewegen können.

<sup>†</sup> Ein Teilchen ist ultrarelativistisch, falls seine Energie sehr viel größer als seine Ruheenergie ist.



über große Strecken erfordert mit klassischen numerischen Methoden eine feine, vielfach die Rechnerressourcen übersteigende, Diskretisierung. Der Grund dafür liegt in dem großen numerischen Phasenfehler, den diese Verfahren für Wellenlängen die mit wenigen Gitterpunkten aufgelöst werden, haben.

Im Rahmen dieser Arbeit sind Modifikationen der klassischen Algorithmen zur Lösung elektromagnetischer Felder hinsichtlich ihres Einsatzes in PIC-Algorithmen für Linearbeschleuniger untersucht worden. Aufgrund der dargelegten qualitativen Kenntnis der elektromagnetischen Felder sind Modifikationen konstruiert worden, die keinen Phasenfehler entlang der Strahlachse haben. Diese Eigenschaft ermöglicht bei gleicher Genauigkeit die Verwendung einer gröberen Diskretisierung als mit den entsprechenden klassischen Algorithmen für PIC-Simulationen in Linearbeschleunigern.

## 1.2 Inhalt der Arbeit

Das zweite Kapitel skizziert die zwei der Arbeit zu Grunde liegenden mathematischen Modelle, im einzelnen die Vlasov und die Maxwell'schen Gleichungen. Inhalt des dritten Kapitels sind die Methode der Finiten Integration und Finite Volumen Methoden zur räumlichen Diskretisierung der Maxwell'schen Gleichungen. Im vierten Kapitel wird die Particle-In-Cell Methode zur Lösung der Vlasov-Gleichung erläutert. Im fünften Kapitel werden die im Rahmen dieser Arbeit neu entwickelten Zeitintegrationsverfahren vorgestellt und analysiert. Das sechste Kapitel behandelt konservative Strominterpolationsalgorithmen, die für die Kopplung der Vlasov-Gleichung mit den Maxwell'schen Gleichungen benötigt werden. Im siebten Kapitel wird ein räumlicher Filter für den Strom und eine Methode zum zeitlichen Filtern der Felder vorgestellt. Die entwickelten Methoden werden im achten Kapitel anhand eines Rechteckresonators und dem Drift eines Elektronen-Bunches validiert. Im neunten Kapitel werden die erfolgversprechendsten Methoden zur Simulation einer Elektronenkanone verwendet.

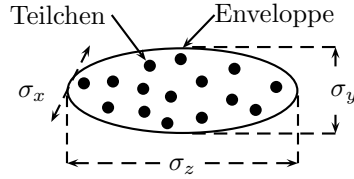
## 2. DAS MATHEMATISCHE MODELL

Um ein physikalisches Phänomen zu simulieren, wird ein mathematisches Modell der ihm zugrunde liegenden Physik benötigt. Im Rahmen der Aufstellung dieses Modells müssen z.B. Annahmen über die Gültigkeit der benutzten physikalischen Gleichungen, der verwendeten Randbedingungen usw. gemacht werden. Im folgenden werden die wesentlichen Aspekte der Modellbildung zur numerischen Lösung der Vlasov und Maxwell'schen Gleichungen dargestellt.

### 2.1 Vlasov-Gleichung

Als Modell für die relativistische Strahldynamik in Teilchenbeschleunigern\* wird die Vlasov-Gleichung verwendet. Dabei wird vorausgesetzt, dass sich die betrachteten Teilchen wie ein stoßfreies Plasma verhalten und die Näherung des mittleren Feldes anwendbar ist [3]. Die Beschreibung gleichartiger Teilchen, mit Ruhemasse  $m_0$  und

**Abb. 2.1:** Zusammenfassung der Teilchen zu einem Bunch der Ausdehnung  $\sigma_x, \sigma_y$  und  $\sigma_z$ . Aufgrund der großen Anzahl von Teilchen in einem Bunch ist eine statistische Beschreibung möglich.



elementarer Ladung  $q_0$ , die ein Ensemble mit der Gesamtmasse  $M$  und Gesamtladung  $Q$  bilden, erfolgt, wie z.B. in [3] ausführlicher dargestellt wird, durch die 1-Teilchen-Verteilungsfunktion  $f = f(\vec{x}, \vec{p}, t)$ :<sup>†</sup>

$$f : \Omega \otimes \Gamma \otimes \mathbb{R}_+ \mapsto \mathbb{R}_+,$$

$$\int_{\Omega \otimes \Gamma} f d^3x d^3p = 1.$$

---

\* Unter Vernachlässigung von Intra-beamscattering.

<sup>†</sup> Eine Liste aller verwendeten Symbole befindet sich im Anhang der Arbeit.

Dabei bezeichnet  $\vec{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^3$  den Ort,  $\vec{p} \in \Gamma \subset \mathbb{R}^3$  den Impuls und  $t \in \mathbb{R}_+$  die Zeit. Durch  $f$  ist die Raumladungsdichte  $\varrho = \varrho(\vec{x}, t)$  der Teilchenspezies definiert als

$$\varrho := Q \int_{\Gamma} f d^3p, \quad (2.1)$$

und über den Mittelwert der Geschwindigkeit  $\vec{v}$  ist die Stromdichte  $\vec{J} = \vec{J}(\vec{x}, t)$  definiert als

$$\vec{J} := Q \int_{\Gamma} \vec{v} f d^3p, \quad \vec{v} = \frac{\vec{p}/m_0}{\sqrt{1 + (p/(m_0 c_0))^2}}. \quad (2.2)$$

Dabei bezeichnet  $c_0$  die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum.

Die zeitliche Dynamik von  $f$  wird durch die Vlasov-Gleichung

$$\partial_t f + \vec{v} \partial_{\vec{x}} f + \vec{F}_L \partial_{\vec{p}} f = 0 \quad (2.3)$$

mit der Anfangsbedingung

$$f(\vec{x}, \vec{p}, t = 0) = f_0(\vec{x}, \vec{p}) \quad (2.4)$$

und der Randbedingung

$$f(\vec{x}, \vec{p}, t) = g(\vec{x}, \vec{p}, t), \quad \vec{x} \in \partial\Omega \text{ und } \vec{p} \cdot \vec{n} < 0 \quad (2.5)$$

beschrieben. Der Vektor  $\vec{n}$  in (2.5) steht für die nach außen gerichtete Normale auf dem Rand  $\partial\Omega$ . Die Funktion  $g(\vec{x}, \vec{p}, t)$  ist ein auf einer Teilmenge der Oberfläche  $\partial\Omega$  konzentrierter Quellterm.

Von den auf die Teilchen einwirkenden Kräften wird nur die von den elektromagnetischen Feldern  $\vec{E}$  und  $\vec{B}$  ausgehende Lorentzkraft

$$\vec{F}_L = Q \left( \vec{E} + \vec{v} \times \vec{B} \right) \quad (2.6)$$

berücksichtigt.

## 2.2 Maxwellsche Gleichungen

Die Dynamik der elektromagnetischen Felder in ruhenden Medien wird durch die makroskopischen Maxwellschen Gleichungen in differentieller Form durch

$$\operatorname{div} \vec{D} = \varrho, \quad \operatorname{rot} \vec{E} = -\partial_t \vec{B}, \quad (2.7)$$

$$\operatorname{div} \vec{B} = 0, \quad \operatorname{rot} \vec{H} = \partial_t \vec{D} + \vec{J} \quad (2.8)$$

beschrieben. Es steht  $\vec{E} = \vec{E}(\vec{x}, t)$  für die elektrische Feldstärke,  $\vec{D} = \vec{D}(\vec{x}, t)$  für die elektrische Flussdichte,  $\vec{H} = \vec{H}(\vec{x}, t)$  für die magnetische Feldstärke und  $\vec{B} = \vec{B}(\vec{x}, t)$  für die magnetische Flussdichte. Die Stromdichte und Raumladungsdichte erfüllen die Kontinuitätsgleichung

$$\partial_t \varrho + \operatorname{div} \vec{J} = 0. \quad (2.9)$$

Für Raumladungsdichten und Stromdichten, die aus (2.1) und (2.2) berechnet werden, ist wegen (2.3) die Kontinuitätsgleichung (2.9) immer erfüllt.

Für die später betrachtete Anwendung in der Beschleunigerphysik ist die Annahme von isotropen, linearen, frequenzunabhängigen Materialien gerechtfertigt. Die Feldgrößen sind dann über die Permittivität  $\varepsilon = \varepsilon(\vec{x})$ , für die wir  $\varepsilon \geq 0$  annehmen, und die Permeabilität  $\mu = \mu(\vec{x})$ , für die wir  $\mu \geq 0$  voraussetzen, durch die Beziehungen

$$\vec{D} = \varepsilon \vec{E}, \quad \vec{B} = \mu \vec{H} \quad (2.10)$$

miteinander verknüpft.

Für unstetige Lösungen der Felder mit Sprüngen auf einer stationären Fläche mit der Flächennormalen  $\vec{n}_{12}$ , die von Region 2 nach der Region 1 zeigt, werden die Sprungbedingungen

$$\begin{aligned} \vec{n}_{12} \cdot (\vec{D}_1 - \vec{D}_2) &= \varrho_s, & \vec{n}_{12} \cdot (\vec{B}_1 - \vec{B}_2) &= \varrho_{ms}, \\ \vec{n}_{12} \times (\vec{E}_1 - \vec{E}_2) &= -\vec{J}_{ms}, & \vec{n}_{12} \times (\vec{H}_1 - \vec{H}_2) &= \vec{J}_s \end{aligned} \quad (2.11)$$

gefordert [4]. Dabei bezeichnen  $\varrho_s$ ,  $\varrho_{ms}$  eine elektrische, bzw. magnetische Oberflächenladungsdichte und  $\vec{J}_s$ ,  $\vec{J}_{ms}$  eine elektrische, bzw. magnetische Oberflächenstromdichte.

Als Randbedingung für die elektromagnetischen Felder auf dem Rand  $\partial\Omega$  mit der nach außen gerichteten Flächennormalen  $\vec{n}$  wird im Rahmen dieser Arbeit immer die eines perfekten elektrischen Leiters (engl. Perfect Electric Conductor, PEC)

$$\vec{n} \times \vec{E}(\vec{x}, t) = 0, \quad \vec{x} \in \partial\Omega \quad (2.12)$$

angenommen. Die Sprungbedingungen ergeben sich in diesem Fall zu

$$\begin{aligned} \vec{n} \cdot \vec{D} &= \varrho_s, & \vec{n} \cdot \vec{B} &= 0 \\ \vec{n} \times \vec{E} &= 0, & \vec{n} \times \vec{H} &= \vec{J}_s. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Neben der differentiellen Formulierung (2.7) und (2.8) gibt es die zwei äquivalenten Integraldarstellungen der Maxwell'schen Gleichungen:

$$\begin{aligned} \int_{\partial V} \vec{D} \cdot d\vec{A} &= \int_V \varrho \, dV, & \int_{\partial V} \vec{B} \cdot d\vec{A} &= 0, & \forall V \in \Omega \\ \int_{\partial A} \vec{E} \cdot d\vec{s} &= -\frac{d}{dt} \int_A \vec{B} \cdot d\vec{A}, & \int_{\partial A} \vec{H} \cdot d\vec{s} &= \frac{d}{dt} \int_A \vec{D} \cdot d\vec{A} + \int_A \vec{J} \cdot d\vec{A} & \forall A \in \Omega \end{aligned} \quad (2.14)$$

und

$$\begin{aligned} \int_{\partial V} \vec{D} \cdot d\vec{A} &= \int_V \varrho \, dV, & \int_{\partial V} \vec{B} \cdot d\vec{A} &= 0, & \forall V \in \Omega \\ \int_{\partial V} d\vec{A} \times \vec{E} &= -\frac{d}{dt} \int_V \vec{B} \, dV, & \int_{\partial V} d\vec{A} \times \vec{H} &= \frac{d}{dt} \int_V \vec{D} \, dV + \int_V \vec{J} \, dV & \forall V \in \Omega \end{aligned} \quad (2.15)$$

Die Volumen  $V$  und Flächen  $A$  in den Integraldarstellungen (2.14) und (2.15) sind beliebig, aber zeitunabhängig. Sie bilden die Grundlage für die später angewandten numerischen Methoden. Im Gegensatz zur differentiellen Form ist eine Sonderbehandlung von unstetigen Lösungen für die integralen Formulierungen nicht nötig, lediglich ihre Gültigkeit muss postuliert werden.

Zum Zweck eines Vergleichs mit den später vorgestellten numerischen Methoden sei das Pointingsche Theorem angegeben

$$\frac{d}{dt} \mathcal{E} = - \int_V \vec{E} \cdot \vec{J} \, dV - \int_{\partial V} (\vec{E} \times \vec{H}) \cdot d\vec{A}, \quad (2.16)$$

$$\mathcal{E} := \frac{1}{2} \int_V (\vec{D} \cdot \vec{E} + \vec{B} \cdot \vec{H}) \, dV, \quad (2.17)$$

welches die zeitliche Änderung der Energie  $\mathcal{E}$  des elektromagnetischen Feldes in einem Volumen  $V$  beschreibt. Unter der Voraussetzung von PEC-Randbedingungen und der Abwesenheit von Strömen folgt aus dem Pointingschen Theorem die Erhaltung der Feldenergie. Dies gilt, wie später gezeigt wird, nicht notwendigerweise für alle numerischen Verfahren zur Lösung der Maxwell'schen Gleichungen.

# 3. RÄUMLICHE DISKRETISIERUNGSVERFAHREN FÜR DIE MAXWELLSCHEN GLEICHUNGEN

## 3.1 Methode der Finiten Integration

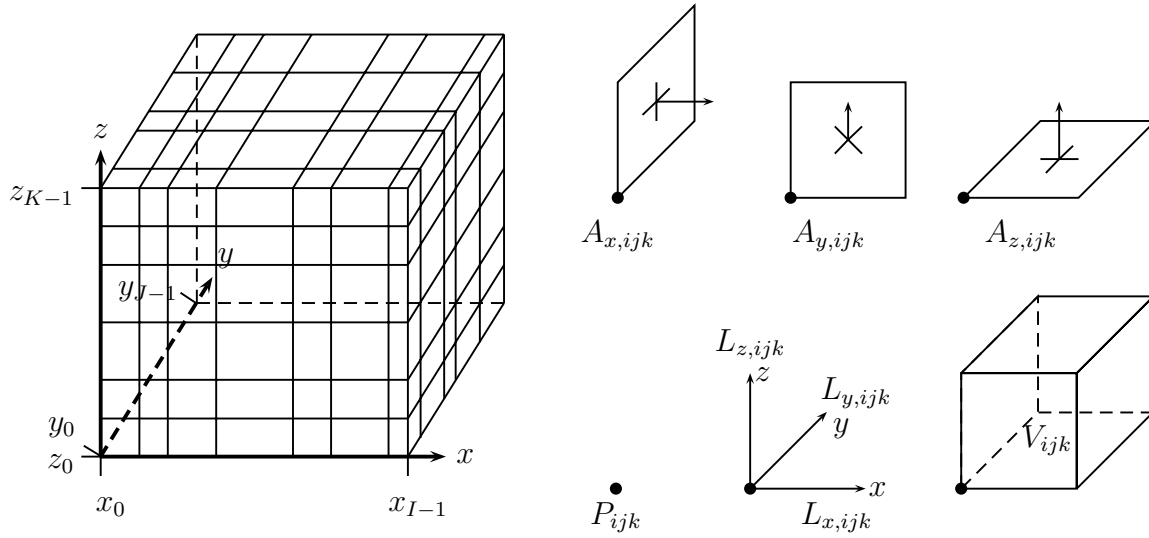
Die Beschreibung der Methode der Finiten Integration (engl. „Finite Integration Theory“, FIT) beschränkt sich in diesem Kapitel auf die räumliche Diskretisierung für ein kartesisches Gitter\*. Es werden kurz die für diese Arbeit wichtigsten Eigenschaften angegeben. Dieses sind die algebraische Beziehungen zwischen Operatoren, die Formulierung als ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen, die semidisreten Erhaltungssätze für Energie und Ladung, sowie die numerische Stabilität.

### 3.1.1 Kartesisches Gitter

Um das räumliche Gebiet zu diskretisieren, wird ein kartesisches Gitter [5], welches im folgendem mit  $G$  bezeichnet wird, eingeführt. Das dreidimensionale, kartesische Gitter  $G$  wird als ein Tensorprodukt von drei eindimensionalen Gittern entlang der  $x$ -,  $y$ - und  $z$ -Achse mit jeweils  $I$ ,  $J$  und  $K$  Gitterpunkten definiert. Aufgrund dieser Struktur ist es möglich allen Punkten  $P$ , Kanten  $L_x, L_y, L_z$ , Flächen  $A_x, A_y, A_z$  und Zellvolumen  $V$  durch die drei Indizes  $i, j, k$  eineindeutig zu assoziieren, siehe Abb. 3.1. Die Abstände zwischen zwei Gitterpunkten in  $x, y$  und  $z$ -Richtung werden durch  $\Delta x_i := x_{i+1} - x_i$ ,  $\Delta y_j := y_{j+1} - y_j$  und  $\Delta z_k := z_{k+1} - z_k$  definiert. Für den Fall eines homogenen Gitters bezeichnen  $\Delta x$ ,  $\Delta y$  und  $\Delta z$  die Abstände zwischen zwei Gitterpunkten in den drei Raumrichtungen  $x, y$  und  $z$ . Falls alle Abstände zwischen den Gitterpunkten äquidistant sind, d.h.  $\Delta x = \Delta y = \Delta z$  gilt, so wird der Abstand mit  $\Delta$  bezeichnet.

---

\* Eine Formulierung auf allgemeineren Gittern ist möglich, siehe z.B. [6].



**Abb. 3.1:** Ein kartesisches Gitter, seine Indizierung und die mit ihm assoziierten Elementarfiguren.

### 3.1.2 Gitter-Maxwellgleichungen

Ausgangspunkt für die FIT [9, 10] ist die integrale Formulierung der Maxwell'schen Gleichungen (2.14). Diese Gleichungen werden durch die Einführung eines kartesischen Gitters  $G$  und des mit ihm assoziierten dualen Gitters  $\tilde{G}$  (siehe [9]) diskretisiert. Anstatt wie im Kontinuierlichen, die Gültigkeit von (2.14) für all möglichen Volumen, Flächen und Pfade zu verlangen, besteht die räumliche Diskretisierung darin, nur bestimmte, durch  $G$  und  $\tilde{G}$  definierte Gitterprimitive zu berücksichtigen. Die dabei betrachteten diskreten Größen in  $x$ -Richtung sind

$$\begin{aligned}
 \mathbf{e}_{x,ijk} &:= \int_{L_{x,ijk}} \vec{E} \cdot d\vec{s}, & \mathbf{h}_{x,ijk} &:= \int_{\tilde{L}_{x,ijk}} \vec{H} \cdot d\vec{s}, \\
 \mathbf{\hat{d}}_{x,ijk} &:= \int_{\tilde{A}_{x,ijk}} \vec{D} \cdot d\vec{A}, & \mathbf{\hat{b}}_{x,ijk} &:= \int_{A_{x,ijk}} \vec{B} \cdot d\vec{A}, \\
 \mathbf{\hat{j}}_{x,ijk} &:= \int_{\tilde{A}_{x,ijk}} \vec{J} \cdot d\vec{A}, & \mathbf{q}_{ijk} &:= \int_{\tilde{V}_{ijk}} \varrho \, dV.
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

Analog werden die diskreten integralen Größen in  $y$ - und  $z$ -Richtung definiert. Um eine kompakte Matrixschreibweise zu ermöglichen, werden die Größen aus (3.1) in Vektoren der Form

$$\mathbf{\hat{e}} := (\mathbf{\hat{e}}_{x,ijk}, \mathbf{\hat{e}}_{y,ijk}, \mathbf{\hat{e}}_{z,ijk})^T, \dots$$

organisiert. Mit den durch

$$\begin{aligned}
 [\mathbf{P}_x]_{ijk,rpq} &:= \begin{cases} -1 & r = i, p = j, q = k \\ 1 & r = i + 1, p = j, q = k, \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \\
 [\mathbf{P}_y]_{ijk,rpq} &:= \begin{cases} -1 & r = i, p = j, q = k \\ 1 & r = i, p = j + 1, q = k, \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \\
 [\mathbf{P}_z]_{ijk,rpq} &:= \begin{cases} -1 & r = i, p = j, q = k \\ 1 & r = i, p = j, q = k + 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

definierten Vorwärtsdifferenzenoperatoren lassen sich die diskreten Rotationsoperatoren  $\mathbf{C}$ ,  $\tilde{\mathbf{C}}$  und Divergenzoperatoren  $\mathbf{S}$ ,  $\tilde{\mathbf{S}}$  auf den primären, dualen Gittern  $G$ ,  $\tilde{G}$  als

$$\begin{aligned}
 \mathbf{S} &:= (\mathbf{P}_x, \mathbf{P}_y, \mathbf{P}_z), & \tilde{\mathbf{S}} &:= -(\mathbf{P}_x^T, \mathbf{P}_y^T, \mathbf{P}_z^T), \\
 \mathbf{C} &:= \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{P}_z & \mathbf{P}_y \\ \mathbf{P}_z & 0 & -\mathbf{P}_x \\ -\mathbf{P}_y & \mathbf{P}_x & 0 \end{pmatrix}, & \tilde{\mathbf{C}} &:= \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{P}_z^T & -\mathbf{P}_y^T \\ -\mathbf{P}_z^T & 0 & \mathbf{P}_x^T \\ \mathbf{P}_y^T & -\mathbf{P}_x^T & 0 \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{3.3}$$

schreiben. Die in (3.2) und (3.3) definierten Operatoren haben die folgenden algebraischen Eigenschaften

$$[\mathbf{P}_\alpha, \mathbf{P}_\beta] = 0, \quad \alpha, \beta \in \{x, y, z\}, \tag{3.4}$$

$$\mathbf{C}^T = \tilde{\mathbf{C}}, \quad \mathbf{S}\mathbf{C} = 0, \quad \tilde{\mathbf{S}}\tilde{\mathbf{C}} = 0, \tag{3.5}$$

welche in [11] bewiesen sind. Mit Hilfe dieser Operatoren kann die Dynamik der diskreten Felder durch die sogenannten Gitter-Maxwellgleichungen (GMGl)

$$\mathbf{C}\mathbf{e} = -\frac{d}{dt}\widehat{\mathbf{b}}, \quad \tilde{\mathbf{S}}\widehat{\mathbf{d}} = \mathbf{q}, \tag{3.6}$$

$$\tilde{\mathbf{C}}\widehat{\mathbf{h}} = \frac{d}{dt}\widehat{\mathbf{d}} + \widehat{\mathbf{j}}, \quad \mathbf{S}\widehat{\mathbf{b}} = 0 \tag{3.7}$$

beschrieben werden. Die Herleitung der GMGl enthält keine Näherungen, sie stellen lediglich die Anwendung der integralen Formulierung (2.14) der Maxwell'schen Gleichungen auf dem Gitter dar.



### 3.1.3 Materialbeziehungen

Um die GMG1 lösen zu können, muss eine Relation zwischen den auf Gitterflächen definierten Größen  $\widehat{\mathbf{d}}$ ,  $\widehat{\mathbf{b}}$  und den auf Gitterkanten definierten Größen  $\widehat{\mathbf{e}}$ ,  $\widehat{\mathbf{h}}$  gefunden werden. Dazu ist es nötig, einen Zusammenhang zwischen Linien- und Flächenintegralen unter Berücksichtigung der kontinuierlichen Materialbeziehungen (2.10) aufzustellen. Dies ist, im Gegensatz zur Aufstellung der GMG1, nur approximativ möglich. Für lineare Materialien sind die diskreten Materialbeziehungen über die Materialoperatoren  $\mathbf{M}_\varepsilon$  und  $\mathbf{M}_\mu$  durch

$$\widehat{\mathbf{d}} := \mathbf{M}_\varepsilon \widehat{\mathbf{e}}, \quad \widehat{\mathbf{b}} := \mathbf{M}_\mu \widehat{\mathbf{h}} \quad (3.8)$$

definiert\*. Die im Rahmen dieser Arbeit betrachteten Materialoperatoren haben einen Diskretisierungsfehler von zweiter Ordnung im Raum und sind diagonale, positiv definite Matrizen†. Für eine Diskussion der Materialoperatoren und ihre Erweiterung auf höherer Ordnung sei der Leser auf [12] verwiesen.

### 3.1.4 Formulierung als System gewöhnlicher Differentialgleichungen

Für die spätere Lösung der semidiskreten GMG1 ist es von Vorteil, sie als ein System von gewöhnlichen Differentialgleichungen in der kompakten Form

$$\frac{d}{dt} \mathbf{y} = \mathbf{A} \mathbf{y} + \mathbf{b} \quad (3.9)$$

mit

$$\mathbf{y} := \begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{h}} \\ \widehat{\mathbf{e}} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A} := \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} \\ \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{C}^T & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} := \begin{pmatrix} 0 \\ -\mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \widehat{\mathbf{j}} \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

zu schreiben, da diese Form die Anwendung von Standard-Methoden zur Lösung gewöhnlicher Differentialgleichungen ermöglicht.

### 3.1.5 Semidiskrete Erhaltungssätze

Für die FIT gilt, wie z.B. in [13] gezeigt, der Erhaltungssatz

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \mathcal{E}_h + \langle \widehat{\mathbf{e}}, \widehat{\mathbf{j}} \rangle = 0 \quad (3.11)$$

---

\* Allgemeine Materialbeziehungen können durch Hinzunahme von diskreten elektrischen Polarisationsflüssen und diskreten Magnetisierungsspannungen formuliert werden.

† Die Matrizen sind streng genommen nur innerhalb des eigentlichen Rechengebietes positiv definit.

für die durch

$$\mathcal{E}_h := \langle \widehat{\mathbf{e}}, \mathbf{M}_\varepsilon \widehat{\mathbf{e}} \rangle + \langle \widehat{\mathbf{h}}, \mathbf{M}_\mu \widehat{\mathbf{h}} \rangle \quad (3.12)$$

definierte diskrete Energie  $\mathcal{E}_h$ . Dies ist das diskrete Analogon zum Poyntingschen Theorem für PEC-Randbedingungen.

Der andere für diese Arbeit wichtige Erhaltungssatz ist für die diskrete elektrische Ladung  $\mathbf{q}$

$$\frac{d}{dt} \mathbf{q} + \widetilde{\mathbf{S}} \widehat{\mathbf{j}} = 0. \quad (3.13)$$

Dieser als semidiskrete Kontinuitätsgleichung bezeichnete Erhaltungssatz folgt unmittelbar aus der algebraischen Identität (3.5) zwischen dem diskreten Rotations- und Divergenzoperator auf dem dualen Gitter. Für eine weiterführende Diskussion der Erhaltungssätze für die FIT sei der Leser auf [13, 14] verwiesen.

### 3.1.6 Räumliche Stabilität

Das semidiskrete System (3.9) ist stabil in dem Sinne, dass bei der Abwesenheit von Leitungs- und Konvektionsstromdichten gilt

$$\frac{d}{dt} \|\mathbf{y}\|_h \leq 0 \quad (3.14)$$

in der durch  $\|\mathbf{y}\|_h := \mathcal{E}_h$  definierten Norm. Diese physikalische Definition der Stabilität impliziert die Beschränktheit von  $\mathbf{y}$

$$\exists M > 0 \forall t > 0 \text{ gilt } \|\mathbf{y}\|_h \leq M. \quad (3.15)$$

Desweiteren ist das semidiskrete System nicht dissipativ, da  $\frac{d}{dt} \|\mathbf{y}\|_h = 0$  ist. Die beiden Aussagen folgen unmittelbar aus dem Erhalt der semidiskreten Energie (3.11) und der Tatsache, dass sie eine Norm definiert.

## 3.2 Finite Volumen Methoden

Die Finiten Volumen Methoden (FVM) sind eine Klasse von Diskretisierungsverfahren, die ursprünglich für die numerische Strömungsmechanik (engl. „Computational Fluid Dynamics“, CFD) entwickelt wurden. Seit den Arbeiten von Shankar et al. [15] finden FVM auch Anwendung zur numerischen Berechnung von elektromagnetischen Feldern. Als Vorzüge der FVM ist einerseits ihre geometrische Flexibilität und andererseits ihre Eigenschaft, Lösungen mit großen Feldgradienten numerisch robust behandeln zu können, aufzuführen. Die zuletzt genannte Eigenschaft lässt sie für die numerische Berechnung von Raumladungsfeldern in der Beschleunigerphysik als geeignet erscheinen.

### 3.2.1 Maxwell'schen Gleichungen als Erhaltungssatz

Ausgangspunkt für die Diskussion der FVM ist die Interpretation der Ampereschen und Faradayschen Gesetze als ein System von Erhaltungssätzen der Form

$$\partial_t \mathbf{Q} + \operatorname{div} \mathbf{F} = \mathbf{S} \quad (3.16)$$

mit der Flusstensordichte  $\mathbf{F}$  und einer Quelltermdichte  $\mathbf{S}$ . Für kartesische Koordinaten und in drei Dimensionen ist die explizite Form von (3.16) durch

$$\partial_t \mathbf{Q} + \partial_x \mathbf{F}_x + \partial_y \mathbf{F}_y + \partial_z \mathbf{F}_z = \mathbf{S} \quad (3.17)$$

gegeben. Die vektoriellen Größen  $\mathbf{F}_x$ ,  $\mathbf{F}_y$  und  $\mathbf{F}_z$  werden als Flussdichten bezeichnet. Ein Vergleich von (3.17) mit dem hyperbolischen Teil der Maxwell'schen Gleichungen ergibt

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \mu \vec{H} \\ \varepsilon \vec{E} \end{pmatrix}, \mathbf{F}_x = \begin{pmatrix} \hat{e}_x \times \vec{E} \\ -\hat{e}_x \times \vec{H} \end{pmatrix}, \mathbf{F}_y = \begin{pmatrix} \hat{e}_y \times \vec{E} \\ -\hat{e}_y \times \vec{H} \end{pmatrix}, \mathbf{F}_z = \begin{pmatrix} \hat{e}_z \times \vec{E} \\ -\hat{e}_z \times \vec{H} \end{pmatrix}, \mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ -\vec{J} \end{pmatrix}, \quad (3.18)$$

dabei steht  $\hat{e}_x$ ,  $\hat{e}_y$  und  $\hat{e}_z$  für den Einheitsvektor in x-, y- und z-Richtung. Durch Integration von (3.17) über ein beliebiges Volumen, das o.B.d.A., die Form

$$V_{ijk} := [u_{i-1/2}, u_{i+1/2}] \times [v_{j-1/2}, v_{j+1/2}] \times [w_{k-1/2}, w_{k+1/2}]$$

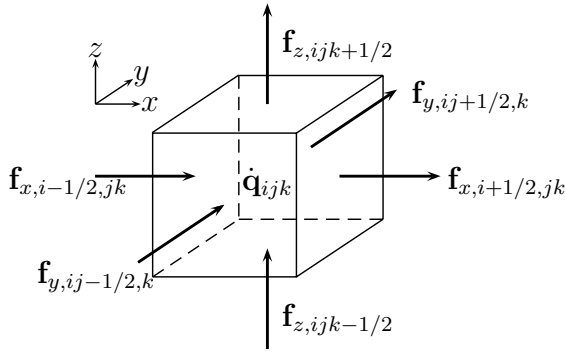
mit Inhalt  $V_{ijk}$  habe, und der komponentenweise Anwendung des Gauss'schen Satzes, kann das System von Erhaltungssätzen (3.17) als

$$\begin{aligned} V_{ijk} \frac{d}{dt} \mathbf{q}_{ijk} &= \mathbf{f}_{x,i-1/2,jk}(\mathbf{Q}) - \mathbf{f}_{x,i+1/2,jk}(\mathbf{Q}) + \mathbf{f}_{y,ij,j-1/2,k}(\mathbf{Q}) \\ &\quad - \mathbf{f}_{y,ij,j+1/2,k}(\mathbf{Q}) + \mathbf{f}_{z,ij,jk,k-1/2}(\mathbf{Q}) - \mathbf{f}_{z,ij,jk,k+1/2}(\mathbf{Q}) + V_{ijk} \mathbf{s}_{ijk} \end{aligned} \quad (3.19)$$

mit den Größen

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_{ijk} &:= \frac{1}{V_{ijk}} \int_{V_{ijk}} \mathbf{Q} \, dV, \quad \mathbf{s}_{ijk} := \frac{1}{V_{ijk}} \int_{V_{ijk}} \mathbf{S} \, dV, \\ \mathbf{f}_{x,i+1/2,jk}(\mathbf{Q}) &:= \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \int_{z_{k-1/2}}^{z_{k+1/2}} \mathbf{F}_x(\mathbf{Q}(u_{i+1/2}, y, z)) \, dz \, dy, \\ \mathbf{f}_{y,ij,j+1/2,k}(\mathbf{Q}) &:= \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \int_{z_{k-1/2}}^{z_{k+1/2}} \mathbf{F}_y(\mathbf{Q}(x, v_{j+1/2}, z)) \, dz \, dx, \\ \mathbf{f}_{z,ij,jk,k+1/2}(\mathbf{Q}) &:= \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \mathbf{F}_z(\mathbf{Q}(x, y, w_{k+1/2})) \, dy \, dx \end{aligned} \quad (3.20)$$

geschrieben werden. Die Größen  $\mathbf{f}$  sind die Flüsse durch den Rand des Volumens  $V_{ijk}$ . Zusammen mit der volumengemittelten Quelltermdichte  $\mathbf{s}_{ijk}$  bestimmen sie die zeitliche Entwicklung der volumengemittelten Erhaltungsgrößen  $\mathbf{q}_{ijk}$  (siehe Abb. 3.2).



**Abb. 3.2:** Flussbilanz für das Volumen  $V_{ijk}$  unter Vernachlässigung der volumengemittelten Quelltermdichte  $\mathbf{s}_{ijk}$ .

Die physikalische Interpretation von (3.19) ist die einer Bilanzgleichung für jede Komponente von  $\mathbf{Q}$ , in Analogie zu der Kontinuitätsgleichung in der Elektrodynamik. Gleichung (3.19) ist äquivalent zu dem zeitabhängigen Teil der integralen Form der Maxwell'schen Gleichungen (2.15), lediglich die Interpretation als ein System von Erhaltungssätzen ist als ein neuer mathematischer Aspekt hinzugekommen.

### 3.2.2 Formulierung als System gewöhnlicher Differentialgleichungen

In der FVM dient die integrale Form (3.19) des Erhaltungssatzes (3.17) als Ausgangspunkt zur Diskretisierung der Ampèreschen und Faradayschen Gesetze. Die beliebigen Volumen in (3.19) werden auf die elementaren Volumen eines Gitters, die sogenannten Kontrollvolumen, beschränkt. Die diskreten Freiheitsgrade des Feldes sind somit die über die Kontrollvolumen gemittelten Größen  $\mathbf{q}_{ijk}$ . Gemäß (3.17) ist die zeitliche Ableitung von  $\mathbf{q}_{ijk}$  durch die von der exakten Lösung  $\mathbf{Q}_{ijk}$  punktweise abhängigen Flüssen  $\mathbf{f}$ , siehe (3.20), bestimmt. Da für die numerische Berechnung nur die volumengemittelten Größen  $\mathbf{q}_{ijk}$  bekannt sind, ist eine exakte Berechnung der Flüsse  $\mathbf{f}$  nicht möglich. In einer FVM müssen sie daher durch sogenannte numerische Flüsse  $\mathbf{g}$ , die nur von  $\mathbf{q}_{ijk}$  abhängig sind, approximiert werden. Die allgemeine Form einer semidiskreten, zellzentrierten FVM für ein kartesisches Gitter mit Kontrollvolumen  $V_{ijk}$  ist somit durch

$$\begin{aligned} V_{ijk} \frac{d}{dt} \mathbf{q}_{ijk} = & \mathbf{g}_{x,i-1/2,j,k}(\{\mathbf{q}_{ijk}\}) - \mathbf{g}_{x,i+1/2,j,k}(\{\mathbf{q}_{ijk}\}) + \\ & \mathbf{g}_{y,i,j-1/2,k}(\{\mathbf{q}_{ijk}\}) - \mathbf{g}_{y,i,j+1/2,k}(\{\mathbf{q}_{ijk}\}) + \\ & \mathbf{g}_{z,ij,k-1/2}(\{\mathbf{q}_{ijk}\}) - \mathbf{g}_{z,ij,k+1/2}(\{\mathbf{q}_{ijk}\}) + \\ & V_{ijk} \mathbf{s}_{ijk} . \end{aligned} \quad (3.21)$$

gegeben und eineindeutig durch die Wahl der numerischen Flüsse  $\mathbf{g}$  bestimmt.

Die Konstruktion der numerischen Flüsse  $\mathbf{g}$  für die im Rahmen dieser Arbeit verwendeten klassischen FVM soll im folgendem beschrieben werden. Dabei wird angenommen, dass die Materialeigenschaften innerhalb eines Volumens  $V_{ijk}$  konstant sind

und die Werte  $\varepsilon_{ijk}$  und  $\mu_{ijk}$  haben. Ausgehend von der Definition der exakten Flüsse als Oberflächenintegrale (3.20), wird zuerst der Integrand  $(\vec{E}, \vec{H})$ , siehe (3.18), durch die integralen Mittelwerte

$$\mathbf{q} = (\varepsilon_{ijk} \vec{e}_{ijk}, \mu_{ijk} \vec{h}_{ijk}), \quad \vec{e}_{ijk} := \frac{1}{V_{ijk}} \int_{V_{ijk}} \vec{E} \, dV, \quad \vec{h}_{ijk} := \frac{1}{V_{ijk}} \int_{V_{ijk}} \vec{H} \, dV \quad (3.22)$$

approximativ rekonstruiert. Dies geschieht innerhalb einer Zelle durch den linearen Ansatz

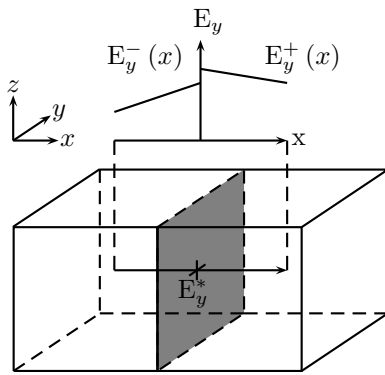
$$\begin{aligned} \vec{E}_{ijk}(\vec{x}) &= \vec{e}_{ijk} + \left( (\vec{x} - \vec{x}_{ijk}) \cdot \vec{S} \right) \vec{e}_{ijk}, \\ \vec{H}_{ijk}(\vec{x}) &= \vec{h}_{ijk} + \left( (\vec{x} - \vec{x}_{ijk}) \cdot \vec{S} \right) \vec{h}_{ijk} \end{aligned} \quad (3.23)$$

für die elektromagnetischen Felder. Dabei steht,  $\vec{S}$ , für den durch  $\vec{S} := (S_x, S_y, S_z)$  mit den diskreten Ableitungen

$$(S_x f)_{ijk} := \frac{2}{\Delta x_i + \Delta x_{i-1}} (D_x^o f)_{ijk}, \dots \quad (3.24)$$

definierten Steigungsoperator, wobei  $D_x^o$  der zentrale Differenzenoperator ist.

Die Integrale für den Fluss in (3.20) können jedoch nicht ohne weiteres ausgewertet werden, da die durch den Ansatz (3.23) approximierten Felder an den Zellgrenzen unstetig sind. Aufgrund dieser Unstetigkeit stehen auf jeder Integrationsfläche zwei Werte für den Integranden zur Verfügung, siehe Abb. 3.3. Die von dem Volumen



**Abb. 3.3:** Der Fluss durch die Grenzfläche zwischen zwei Volumen, in grau dargestellt, ist nicht eindeutig. Für die illustrierte Berechnung von  $E_y$  im Mittelpunkt der Fläche stehen aufgrund der unstetig rekonstruierten Felder ein linker,  $E_y^-$ , und ein rechter,  $E_y^+$ , Grenzwerte zur Verfügung.

links der Fläche her interpolierten Werte werden mit  $\vec{E}^-, \vec{H}^-$  und die vom Volumen rechts der Fläche her interpolierten Werte mit  $\vec{E}^+, \vec{H}^+$  bezeichnet. Durch diese Werte werden die Felder  $\vec{E}^*$  und  $\vec{H}^*$  auf der Integrationsfläche erklärt. Für die

Definition von  $\vec{E}^*$  und  $\vec{H}^*$  werden zwei klassische Wahlen getroffen. Entweder der Mittelwert der Felder

$$\vec{n} \times \vec{E}^* := \frac{1}{2} \vec{n} \times (\vec{E}^- + \vec{E}^+), \quad \vec{n} \times \vec{H}^* := \frac{1}{2} \vec{n} \times (\vec{H}^- + \vec{H}^+) \quad (3.25)$$

oder der Upwind-Wert der Felder

$$\begin{aligned} \vec{n} \times \vec{E}^* &:= \vec{n} \times \frac{(Y^+ \vec{E}^+ + \vec{n} \times \vec{H}^+) + (Y^- \vec{E}^- - \vec{n} \times \vec{H}^-)}{Y^+ + Y^-}, \\ \vec{n} \times \vec{H}^* &:= \vec{n} \times \frac{(Z^- \vec{H}^- + \vec{n} \times \vec{E}^-) + (Z^+ \vec{H}^+ - \vec{n} \times \vec{E}^+)}{Z^+ + Z^-}, \\ Z^\pm &:= \sqrt{\frac{\varepsilon_\pm}{\mu_\pm}}, \quad Y^\pm := 1/Z^\pm. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Letzteres entspricht der exakten Lösung der Maxwell'schen Gleichungen bei Vorgabe von stückweise konstanten Anfangsdaten innerhalb einer Zelle, das sogenannte Riemann-Problem (siehe [16]), nach infinitesimal kleiner Zeit. Die anschließend durch Integration über die Flächen ausgewerteten Flüsse werden in der Literatur für die Wahl (3.25) als Zentrale- und für die Wahl (3.26) als Upwind-Flüsse bezeichnet. Anstatt die Oberflächenintegrale analytisch auszuwerten, werden sie für die linearen Ansatzfunktionen durch die Mittelpunktsquadraturformel\* exakt berechnet. Es bezeichnen

$$\begin{aligned} \vec{E}_{i+1/2,jk}^+ &:= \vec{E}_{i+1jk}(\vec{x}_{i+1/2,jk}), & \vec{E}_{i+1/2,jk}^- &:= \vec{E}_{ijk}(\vec{x}_{i+1/2,jk}), \\ \vec{E}_{ij+1/2,k}^+ &:= \vec{E}_{ij+1k}(\vec{x}_{ij+1/2,k}), & \vec{E}_{ij+1/2,k}^- &:= \vec{E}_{ijk}(\vec{x}_{ij+1/2,k}), \\ \vec{E}_{ij,k+1/2}^+ &:= \vec{E}_{ijk+1}(\vec{x}_{ij,k+1/2}), & \vec{E}_{ij,k+1/2}^- &:= \vec{E}_{ijk}(\vec{x}_{ij,k+1/2}), \\ \vec{H}_{i+1/2,jk}^+ &:= \vec{H}_{i+1jk}(\vec{x}_{i+1/2,jk}), & \vec{H}_{i+1/2,jk}^- &:= \vec{H}_{ijk}(\vec{x}_{i+1/2,jk}), \\ \vec{H}_{ij+1/2,k}^+ &:= \vec{H}_{ij+1k}(\vec{x}_{ij+1/2,k}), & \vec{H}_{ij+1/2,k}^- &:= \vec{H}_{ijk}(\vec{x}_{ij+1/2,k}), \\ \vec{H}_{ij,k+1/2}^+ &:= \vec{H}_{ijk+1}(\vec{x}_{ij,k+1/2}), & \vec{H}_{ij,k+1/2}^- &:= \vec{H}_{ijk}(\vec{x}_{ij,k+1/2}) \end{aligned} \quad (3.27)$$

die zur Quadratur benötigten Funktionswerte in den Mittelpunkten der Oberfläche und  $A_{x,ijk}, A_{y,ijk}, A_{z,ijk}$  die Flächeninhalte eines jeden Gittervoluminas. Dann lassen sich die verwendeten semidiskreten FVM als

$$\begin{aligned} V_{ijk} \mu_{ijk} \frac{d}{dt} \vec{h}_{ijk} &= -\hat{x} \times (\vec{E}_{i+1/2,jk}^* - \vec{E}_{i-1/2,jk}^*) A_{x,ijk} \\ &\quad - \hat{y} \times (\vec{E}_{ij+1/2,k}^* - \vec{E}_{ij-1/2,k}^*) A_{y,ijk} \\ &\quad - \hat{z} \times (\vec{E}_{ij,k+1/2}^* - \vec{E}_{ij,k-1/2}^*) A_{z,ijk} \end{aligned} \quad (3.28)$$

---

\* Allgemein für polynomiale Rekonstruktionen durch ein Gauss-Legendre Quadratur von hinreichend hoher Ordnung.

$$\begin{aligned}
 V_{ijk}\varepsilon_{ijk}\frac{d}{dt}\vec{e}_{ijk} &= \hat{x} \times \left( \vec{H}_{i+1/2,jk}^* - \vec{H}_{i-1/2,jk}^* \right) A_{x,ijk} \\
 &+ \hat{y} \times \left( \vec{H}_{ij+1/2,k}^* - \vec{H}_{ij-1/2,k}^* \right) A_{y,ijk} \\
 &+ \hat{z} \times \left( \vec{H}_{ijk+1/2}^* - \vec{H}_{ijk-1/2}^* \right) A_{z,ijk} \\
 &- V_{ijk}\vec{j}_{ijk}
 \end{aligned} \tag{3.29}$$

schreiben.

Für die Analyse der algebraischen Eigenschaften der FVM und dem Vergleich mit der FIT wird die folgende Notation eingeführt:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{e} &:= (e_{x,ijk}, e_{y,ijk}, e_{z,ijk})^T, \\
 \mathbf{h} &:= (h_{x,ijk}, h_{y,ijk}, h_{z,ijk})^T, \\
 \mathbf{j} &:= (j_{x,ijk}, j_{y,ijk}, j_{z,ijk})^T
 \end{aligned}$$

sowie Materialmatrizen

$$\begin{aligned}
 \mathbf{M}_\mu &:= \text{diag}(\mu_{ijk}, \mu_{ijk}, \mu_{ijk}), & \mathbf{M}_\varepsilon &:= \text{diag}(\varepsilon_{ijk}, \varepsilon_{ijk}, \varepsilon_{ijk}), \\
 \mathbf{M}_Y &:= \text{diag}(Y_{ijk}, Y_{ijk}, Y_{ijk}), & \mathbf{M}_Z &:= \text{diag}(Z_{ijk}, Z_{ijk}, Z_{ijk}), \\
 \mathbf{M}_{Y,x} &:= \frac{\mathbf{M}_Y}{T_x \mathbf{M}_Y T_x^{-1} + \mathbf{M}_Y}, \text{ usw.}, & \mathbf{M}_{Z,x} &:= \frac{\mathbf{M}_Z}{T_x \mathbf{M}_Z T_x^{-1} + \mathbf{M}_Z}, \text{ usw.}
 \end{aligned}$$

und den Matrizen der inversen Kantenlängen eines Volumens und das der Volumen

$$\begin{aligned}
 L_x &:= \frac{1}{2} \text{diag}(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i), \\
 L_y &:= \frac{1}{2} \text{diag}(\Delta y_{j-1} + \Delta y_j), \\
 L_z &:= \frac{1}{2} \text{diag}(\Delta z_{k-1} + \Delta z_k), \\
 \mathbf{V} &:= \text{diag}(V_{ijk})
 \end{aligned}$$

definiert. Die semidiskreten FVM werden, in Analogie zur FIT, als ein System von gewöhnlichen Differentialgleichungen der Form

$$\frac{d}{dt} \mathbf{y} = \mathbf{A} \mathbf{y} + \mathbf{b} \tag{3.30}$$

mit

$$\mathbf{y} := \begin{pmatrix} \mathbf{h} \\ \mathbf{e} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} := \begin{pmatrix} 0 \\ -\mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{j} \end{pmatrix} \tag{3.31}$$

geschrieben. Abhängig vom gewählten Fluss, ergeben sich die im folgendem beschriebenen Systemmatrizen  $\mathbf{A}_Z$  und  $\mathbf{A}_U$ . Für die FVM werden die Skalarprodukte für skalare Funktionen

$$\langle f, g \rangle_V := \sum_{ijk} V_{ijk} f_{ijk} g_{ijk} \tag{3.32}$$

und für vektorielle Funktionen

$$\langle \mathbf{e}, \mathbf{h} \rangle_V := \langle e_x, h_x \rangle_V + \langle e_y, h_y \rangle_V + \langle e_z, h_z \rangle_V \quad (3.33)$$

erklärt.

### Zentraler Fluss

Für den zentralen Fluss ist die Systemmatrix durch

$$\mathbf{A}_Z := \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} \\ \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{C} & 0 \end{pmatrix} \quad (3.34)$$

mit dem diskreten Rotationsoperator

$$\mathbf{C} := \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{P}_z & \mathbf{P}_y \\ \mathbf{P}_z & 0 & -\mathbf{P}_x \\ -\mathbf{P}_y & \mathbf{P}_x & 0 \end{pmatrix} \quad (3.35)$$

und den diskreten Ableitungen

$$\mathbf{P}_\alpha := L_\alpha^{-1} \left( \mathbf{1} - \frac{1}{4} D_\alpha^+ D_\alpha^- \right) D_\alpha^o, \quad \alpha \in \{x, y, z\} \quad (3.36)$$

für die gilt,

$$\begin{aligned} [\mathbf{P}_\alpha, \mathbf{P}_\beta] &= 0, \quad \alpha, \beta \in \{x, y, z\}, \\ \mathbf{P}_\alpha^T &= -\mathbf{P}_\alpha, \quad \mathbf{C}^T = \mathbf{C} \end{aligned} \quad (3.37)$$

gegeben. Ein Beweis der Beziehungen (3.37) wird in Anhang B.1, B.2 gegeben.

### Upwind-Fluss

Für den Upwind-Fluss ist die Systemmatrix

$$\mathbf{A}_U := \begin{pmatrix} \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{U}_h & -\mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C}_e \\ \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{C}_h & \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{U}_e \end{pmatrix} \quad (3.38)$$

gegeben. Die Rotationsmatrizen werden durch

$$\mathbf{C}_e := \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{P}_{e,z} & \mathbf{P}_{e,y} \\ \mathbf{P}_{e,z} & 0 & -\mathbf{P}_{e,x} \\ -\mathbf{P}_{e,y} & \mathbf{P}_{e,x} & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{C}_h := \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{P}_{h,z} & \mathbf{P}_{h,y} \\ \mathbf{P}_{h,z} & 0 & -\mathbf{P}_{h,x} \\ -\mathbf{P}_{h,y} & \mathbf{P}_{h,x} & 0 \end{pmatrix} \quad (3.39)$$



definiert, die Ableitungsoperatoren haben die Form

$$\begin{aligned}\mathbf{P}_{e,\alpha} &:= L_\alpha^{-1} D_\alpha^- \left( (\mathbf{1} - \mathbf{M}_{Y,\alpha}) T_\alpha + \mathbf{M}_{Y,\alpha} - \frac{1}{2} ((\mathbf{1} - \mathbf{M}_{Y,\alpha}) T_\alpha - \mathbf{M}_{Y,\alpha}) D_\alpha^o \right), \\ \mathbf{P}_{h,\alpha} &:= L_\alpha^{-1} D_\alpha^- \left( (\mathbf{1} - \mathbf{M}_{Z,\alpha}) T_\alpha + \mathbf{M}_{Z,\alpha} - \frac{1}{2} ((\mathbf{1} - \mathbf{M}_{Z,\alpha}) T_\alpha - \mathbf{M}_{Z,\alpha}) D_\alpha^o \right), \quad (3.40) \\ &\alpha \in \{x, y, z\}.\end{aligned}$$

Für den Speziellfall eines homogenen Rechengebiets sind die Rotations-Matrizen  $\mathbf{C}_e$  und  $\mathbf{C}_h$  identisch und stimmen mit den Rotationsmatrizen (3.35) für den zentralen Fluss überein.

Der dissipative Anteil des Upwind-Flusses wird durch die Matrizen

$$\mathbf{U}_e := \begin{pmatrix} \mathbf{U}_{e,y} + \mathbf{U}_{e,z} & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{U}_{e,x} + \mathbf{U}_{e,z} & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{U}_{e,x} + \mathbf{U}_{e,y} \end{pmatrix}, \quad (3.41)$$

$$\mathbf{U}_h := \begin{pmatrix} \mathbf{U}_{h,y} + \mathbf{U}_{h,z} & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{U}_{h,x} + \mathbf{U}_{h,z} & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{U}_{h,x} + \mathbf{U}_{h,y} \end{pmatrix} \quad (3.42)$$

beschrieben. Sie setzen sich aus den Operatoren

$$\mathbf{U}_{e,\alpha} := L_\alpha^{-1} D_\alpha^- \mathbf{M}_Y^{-1} \mathbf{M}_{Y,\alpha} \left( D_\alpha^+ - \frac{1}{2} (T_\alpha + \mathbf{1}) D_\alpha^o \right), \quad (3.43)$$

$$\mathbf{U}_{h,\alpha} := L_\alpha^{-1} D_\alpha^- \mathbf{M}_Z^{-1} \mathbf{M}_{Z,\alpha} \left( D_\alpha^+ - \frac{1}{2} (T_\alpha + \mathbf{1}) D_\alpha^o \right), \alpha \in \{x, y, z\} \quad (3.44)$$

zusammen.

### 3.2.3 Semidiskrete Erhaltungssätze

#### Zentraler Fluss

Für den zentralen Fluss gilt der semidiskrete Energie-Erhaltungssatz

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \mathcal{E}_h + \langle \mathbf{e}, \mathbf{j} \rangle_V = 0 \quad (3.45)$$

für die durch

$$\mathcal{E}_h := \langle \mathbf{e}, \mathbf{M}_\varepsilon \mathbf{e} \rangle_V + \langle \mathbf{h}, \mathbf{M}_\mu \mathbf{h} \rangle_V \quad (3.46)$$

definierte semidiskrete Energie, ein Beweis ist im Anhang B.3 gegeben. Dies ist das diskrete Analogon zum Poyntingschen Theorem für PEC-Randbedingungen.

Mit der Definition

$$\mathbf{q}_{ijk} := \frac{1}{V_{ijk}} \int_{V_{ijk}} \varrho \, dV \quad (3.47)$$

für die volumengemittelten elektrische Ladung und

$$\mathbf{S} := (\mathbf{P}_x, \mathbf{P}_y, \mathbf{P}_z) \quad (3.48)$$

für den diskreten Divergenzoperator von zweiter Ordnung Genauigkeit in Raum wird das diskrete Gauss-Gesetz

$$\mathbf{S} \mathbf{M}_\varepsilon \mathbf{e} = \mathbf{q} \quad (3.49)$$

definiert. Aufgrund der algebraischen Eigenschaft  $\mathbf{S} \mathbf{C} = 0$  folgt die semidiskrete Kontinuitätsgleichung

$$\frac{d}{dt} \mathbf{q} + \mathbf{S} \mathbf{j} = 0. \quad (3.50)$$

### Upwind-Fluss

Für den Upwind-Fluss ist weder eine erhaltene semidiskrete Energie noch eine semidiskrete Kontinuitätsgleichung herzuleiten, was unmittelbar aus einer Fourier-Analyse folgt.

## 3.2.4 Räumliche Stabilität

### Zentraler Fluss

Mittels der erhaltenen semidiskreten Energie (3.45) wird die erhaltene Norm  $\|\mathbf{y}\|_h := \mathcal{E}_h$  definiert. Das semidiskrete System ist dann stabil und nicht dissipativ in dem Sinne, dass bei der Abwesenheit von Leitungs- und Konvektionsstromdichten gilt

$$\frac{d}{dt} \|\mathbf{y}\|_h = 0. \quad (3.51)$$

### Upwind-Fluss

Für den Upwind-Fluss wird die gleiche Norm wie für den zentralen Fluss gewählt

$$\|\mathbf{y}\|_h := \mathcal{E}_h = \langle \mathbf{e}, \mathbf{M}_\varepsilon \mathbf{e} \rangle_V + \langle \mathbf{h}, \mathbf{M}_\mu \mathbf{h} \rangle_V. \quad (3.52)$$

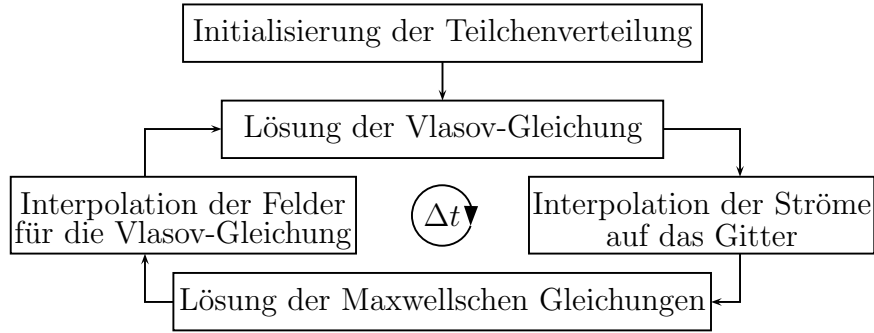
Das semidiskrete System ist stabil in dem Sinne, dass bei der Abwesenheit von Leitungs- und Konvektionsstromdichten gilt

$$\frac{d}{dt} \|\mathbf{y}\|_h \leq 0. \quad (3.53)$$

Ein Beweis wird in Anhang B.3 gegeben.

## 4. DIE PARTICLE-IN-CELL-METHODE

Die PIC-Methode ist eine Klasse von numerischen Verfahren zur Lösung der Vlasov-Maxwell Gleichungen. Sie zeichnet sich dadurch aus, dass in ihr zur Lösung der Maxwell'schen Gleichungen ein gitterbasiertes und zur Lösung der Vlasov-Gleichung ein teilchenbasiertes numerisches Verfahren verwendet wird [17, 18]. Die Verfahrensklasse wird schematisch in Abb. 4.1 durch ein Flussdiagramm für einen Zeitschritt der Größe  $\Delta t$  dargestellt. Im folgendem wird, bis auf die Berechnung der Ströme,



**Abb. 4.1:** Flussdiagramm einer PIC-Methode.

kurz auf die einzelnen Schritte des Flussdiagramms 4.1 eingegangen. Die Interpolation der Ströme auf das Gitter wird erst in Kapitel 6 nach Einführung von volldiskreten Verfahren für die Maxwell'schen Gleichungen behandelt.

### 4.1 Numerische Lösung der Vlasov-Gleichung

Teilchenmethoden zur Lösung der Vlasov-Gleichung basieren darauf, dass ein sogenannter Teilchenansatz der Form

$$f_N(\vec{x}, \vec{u}, t) := \sum_{p=1}^N w_p \delta(\vec{x} - \vec{x}_p(t)) \delta(\vec{u} - \vec{u}_p(t)) \quad (4.1)$$

für einen Bunch mit Ladung  $Q$  und Masse  $M$  eine Lösung der Gleichung (2.3) ist, falls die Orte  $\vec{x}_p$  und dimensionslosen Impulse  $\vec{u}_p$  die charakteristischen Gleichungen

$$\frac{d}{dt} \vec{x}_p = \vec{v}_p, \quad c_0 \frac{d}{dt} \vec{u}_p = \eta \left( \vec{E}_p + \vec{v}_p \times \vec{B}_p \right) \quad (4.2)$$

mit

$$\eta := \frac{q_0}{m_0}, \quad \vec{E}_p := \vec{E}(\vec{x}_p, t), \quad \vec{B}_p := \vec{B}(\vec{x}_p, t) \quad (4.3)$$

erfüllen. Die Gleichungen (4.2) stimmen mit den Newton-Lorentz-Gleichungen für relativistische Teilchen überein. Dies erlaubt die physikalische Interpretation des Tripels  $(w_p, \vec{x}_p, \vec{u}_p)$  als Makroteilchen mit der Masse  $m_p := w_p M$  und Ladung  $q_p := w_p Q$ . Da die Gleichungen (4.2) nicht analytisch gelöst werden können, müssen sie über einen Simulationszeitschritt  $\Delta t$  numerisch integriert werden. Dies geschieht in dieser Arbeit durch den in [19] angegebenen Leap-Frog-Algorithmus von zweiter Ordnung Genauigkeit in der Zeit.

## 4.2 Initialisierung der Teilchenverteilung

Die Anfangsbedingung  $f_0(\vec{x}, \vec{p})$  für die Vlasov-Gleichung (2.3) wird gemäß (4.1) durch Makroteilchen approximiert. Um einen guten Satz von Makroteilchen zum Zeitpunkt  $t = 0$  zu finden, ist ein Kriterium für die Wahl der Makroteilchen aufzustellen. Da es sich bei  $f$  um eine Verteilungsfunktion handelt, haben ihre Momente eine physikalische Bedeutung. Für die Berechnung von RMS-Emittanzen\* werden die ersten und zweiten Momente der Verteilungsfunktion benötigt. Diese Überlegung motiviert die Forderung,

$$\sum_{p=1}^N w_p \Psi_k(\vec{x}_p, \vec{u}_p) = \int_{\Gamma} \int_{\Omega} \Psi_k(\vec{x}, \vec{u}) f_0(\vec{x}, \vec{u}) d^3x d^3u \quad (4.4)$$

für einen Satz von Testfunktionen  $\Psi_k(\vec{x}, \vec{u})$  zu stellen [20]. Die Forderung (4.4) besagt, für die spezielle Wahl  $\{\Psi_k\} = \{xx', x^2, x'^2\}$ , dass die RMS-Emittanz zum Zeitpunkt  $t = 0$  des Teilchen-Ansatz mit der RMS-Emittanz der exakten Verteilungsfunktion  $f_0$  übereinstimmt.

Die Randbedingungen für die Vlasov Gleichung (2.5) werden, in Analogie zu der Anfangsbedingung, durch Makroteilchen, die der Forderung

$$\sum_{p=N+1}^M w_p \Phi_k(\vec{x}_p, \vec{u}_p, t_p) = \int_0^\infty \int_{\partial\Omega} \int_{\Gamma, \vec{n} \cdot \vec{u} < 0} \Phi_k(\vec{x}, \vec{u}, t) g(\vec{x}, \vec{u}, t) d^3u d^3x dt \quad (4.5)$$

genügen, diskretisiert.

---

\* Die RMS-Emittanz für die x-Koordinate wird durch  $\varepsilon_x = \sqrt{x^2 \cdot x'^2 - (\overline{xx'})^2}$  mit  $x' = u_x/u_z$  definiert [21].

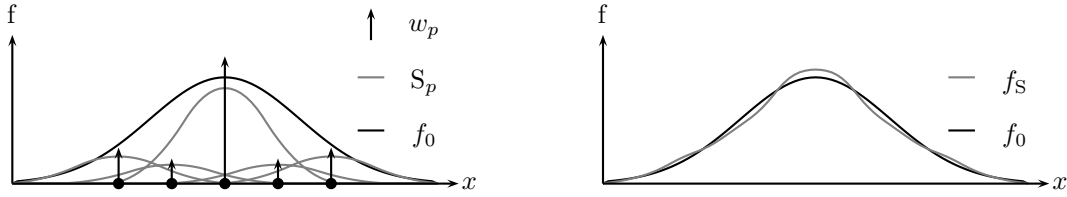
### 4.3 Regularisierung der Teilchenverteilung

Physikalisch gesehen stellt ein Makroteilchen in dem Ansatz (4.1) sehr viele reale Teilchen dar, die sich nicht alle im gleichen Punkt befinden, sondern um ihn herum verteilt sind. Eine direkte Berechnung von physikalischen Größen aus dem Makroteilchenansatz würde daher die statistischen Fluktuationen stark übertreiben, da die Anzahl der Makroteilchen um viele Größenordnungen kleiner als die der realen Teilchen ist. Um dieses zu vermeiden, können im Teilchenansatz  $f_N$  die räumlichen Dirac-Distributionen durch im Raum lokal begrenzte, kontinuierliche Funktion ersetzt werden:

$$f_S(\vec{x}, \vec{u}, t) := \sum_{p=1}^N w_p S(\vec{x} - \vec{x}_p(t)) \delta(\vec{u} - \vec{u}_p(t)) \quad (4.6)$$

Für die Berechnung der Stromdichte gemäß (2.2) führt dies unter anderem zu einem glatteren Verlauf. Die Funktion  $S(\vec{x})$  in (4.6) wird als Formfunktion des Makroteilchens bezeichnet.

Eine Verteilungsfunktion  $f_0$  und die sie approximierenden Teilchen, sowie ihre Formfunktionen  $S_p := S(\vec{x} - \vec{x}_p(t))$  sind in Abb. 4.2(a) dargestellt. Der mit jedem Teilchen assoziierte Pfeil entspricht seinem Entwicklungskoeffizienten  $w_p$ . In Abb. 4.2(b) ist die durch Superposition der Beiträge der jeweiligen Formfunktion eines Makroteilchens erhaltene glatte Approximation der Verteilungsfunktion  $f_0$  dargestellt.



(a) Verteilungsfunktion  $f_0$ , Makroteilchen und Formfunktionen  $S_p$ .

(b) Verteilungsfunktion  $f_0$  und ihre Teilchenapproximation  $f_S$ .

Die häufigste Wahl für die Formfunktionen ist ein Tensorprodukt von skalierten uniformen B-Splines vom Grad  $k$ :

$$S(x, y, z) := \frac{1}{\varepsilon^3} B_k\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) B_k\left(\frac{y}{\varepsilon}\right) B_k\left(\frac{z}{\varepsilon}\right) \quad (4.7)$$

Der Parameter  $\varepsilon$  in (4.7) beschreibt die Ausdehnung eines Makroteilchens und wird typischerweise gleich der Gitterschrittweite des numerischen Verfahrens zur Lösung der Maxwell'schen Gleichungen gewählt. Der Leser sei für eine Definition und die graphische Darstellung einiger uniformer B-Splines auf Anhang D verwiesen.

## 4.4 Interpolation der Felder

Durch die numerische Integration der Maxwellschen Gleichungen mit der FIT oder FVM stehen die Felder nur als integrale Mittelwerte zur Verfügung. Für die FIT sind dies die über die Kanten gemittelten elektrischen Feldstärken und die über die Flächen gemittelten magnetischen Flüsse und für die FVM, die über die Gittervolumen gemittelten elektrischen und magnetischen Felder. Zur Lösung der Lorentz-Newton Gleichungen der Makroteilchen wird das elektromagnetische Feld jedoch am Ort des Makroteilchens und als Punktgröße benötigt, folglich ist die Rekonstruktion des elektromagnetischen Feldes im Raum durch die volumengemittelten Feldwerte nötig. In dieser Arbeit geschieht die Rekonstruktion für die FIT durch Kanten-Elemente für das elektrische Feld und Flächen-Elemente für das magnetische Feld innerhalb einer Zelle (siehe [22]) und für die FVM mit der in Gleichung (3.22) angegebenen Rekonstruktion.

## 5. ZEITINTEGRATION DER SEMIDISKRETEN GLEICHUNGEN

Die in der Beschleunigerphysik auftretenden Raumladungsfelder von ultrarelativistischen Teilchenpaketen sind räumlich extrem anisotrop. Der Grund für die Anisotropie ist die starke Lorentz-Kontraktion der elektromagnetischen Felder. Daher kann für die räumliche Variation dieser Felder ganz allgemein gesagt werden, dass sie in Bewegungsrichtung sehr viel stärker als in der dazu transversalen Richtungen ist. Durch die in diesem Kapitel vorgestellten Modifikationen von traditionellen Verfahren zur Zeitintegration wird erreicht, dass entlang der Bewegungsrichtung des Teilchenpaketes kein numerischer Dispersionsfehler in der Propagationsrichtung eines Teilchenstrahls gemacht wird.

Die im Kapitel 3 aus den Verfahren zur räumlichen Diskretisierung abgeleiteten semidiskreten Gleichungen stellen ein System von linearen, gewöhnlichen Differentialgleichungen dar. Um sie zu lösen, gibt es zwei von der Interpretation der Gleichungen abstammend verschiedene Zugänge. Der erste Zugang besteht darin, die semidiskreten Gleichungen als ein abstraktes, also von ihrem Ursprung als Diskretisierung einer PDE unabhängiges, System von gewöhnlichen Differentialgleichungen zu betrachten und mit einer Standardmethode, wie z.B. einem Runge-Kutta-Verfahren, zu lösen [23]. Als zweite Möglichkeit kann die Zeit, in Analogie zu den räumlichen Variablen, diskretisiert werden und dabei explizit die spezielle Form der zugrunde liegenden PDE genutzt werden. Dies führt zu für die jeweilige PDE angepasste Methoden [24], wie z.B. das Lax-Wendroff-Verfahren und Split-Operator-Verfahren. Ein wichtiger Aspekt bei der Wahl der Methoden zur Zeitintegration ist, dass eine partielle oder sogar vollständige Kompensation des zeitlichen mit dem räumlichen Diskretisierungsfehler möglich ist. Deshalb ist es nötig, den Diskretisierungsfehler der in Raum und Zeit diskreten Gleichungen zu untersuchen. Dies geschieht für alle Verfahren durch eine Fourieranalyse. Um die Konvergenz der in Raum und Zeit diskreten Gleichungen zu untersuchen, wird eine Stabilitätsanalyse vorgenommen. Im Anschluss daran wird untersucht, inwiefern die für die semidiskreten Gleichungen geltenden Erhaltungssätze auch für die in Raum und Zeit diskretisierten Gleichungen gelten oder in einer modifizierten Form weiter gültig sind. Alle in Kapitel 3 hergeleiteten semidiskreten Gleichungen lassen sich als ein System von linearen,

gewöhnlichen Differentialgleichungen der Form

$$\frac{d}{dt}\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{y} + \mathbf{b} \quad (5.1)$$

mit der zeitunabhängigen Systemmatrix  $\mathbf{A}$  und einer zeitabhängigen Anregung  $\mathbf{b}$  schreiben. Die formale Lösung des Systems (5.1) kann mittels der Methode der Variation der Konstanten [25] als

$$\mathbf{y}(t_1) = \exp(\mathbf{A}(t_1 - t_0))\mathbf{y}(t_0) + \int_{t_0}^{t_1} \exp(\mathbf{A}(t - t'))\mathbf{b}(t') dt' \quad (5.2)$$

mit dem Matrixexponential

$$\exp(\mathbf{A}t) := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \mathbf{A}^k t^k \quad (5.3)$$

geschrieben werden. Für praktische Fälle ist es weder möglich noch zweckmäßig, die Gleichung (5.2) auszuwerten. Jedoch spielt die analytische Lösung (5.2) und das in ihr vorkommende Matrixexponential (5.3) eine wichtige theoretische Rolle für die später vorgestellten Split-Operator-Verfahren und die approximative Berücksichtigung der Anregung.

Für die numerische Behandlung des Systems (5.1) wird zunächst von der Anregung  $\mathbf{b}$  abgesehen, sie wird durch die in Abschnitt 5.6 beschriebene Methode berücksichtigt. Zur numerischen Lösung des Systems (5.1) wird die Zeitachse in Intervalle der Größe  $\Delta t$  aufgeteilt und die diskreten Zeitpunkte  $t^{(n)} := \Delta t n$  definiert. Die Lösungsvektoren zu den Zeitpunkten  $t^{(n)}$  werden mit  $\mathbf{y}^{(n)} := \mathbf{y}(t^{(n)})$  bezeichnet. Um das Verhältnis zwischen räumlicher und zeitlicher Diskretisierung zu beschreiben, wird der dimensionslose Courantparameter

$$\sigma := c_0 \Delta t / \Delta \quad (5.4)$$

eingeführt. Für die numerische Lösung des Systems (5.1) werden nur Einschrittverfahren, d.h. Verfahren von der Form

$$\mathbf{y}^{(n+1)} = \mathbf{G}(\Delta t) \mathbf{y}^{(n)} \quad (5.5)$$

betrachtet. Ein Einschrittverfahren wird gemäß (5.5) eindeutig durch seine Propagationsmatrix  $\mathbf{G}$  gekennzeichnet. Für die Stabilität der volldiskreten Gleichung (5.5) in der Norm  $\|\cdot\|_{ht}$  im Sinne von Lax-Richtmeyer [26] ist es nötig, dass für einen beliebig aber festgehaltenen Zeitpunkt  $T$  es eine von  $\Delta t$  und  $\Delta$  unabhängige Konstante  $K$  gibt, so dass gilt:

$$\|\mathbf{y}^{(n)}\|_{ht} \leq K \|\mathbf{y}^{(0)}\|_{ht} \quad \forall n \text{ mit } 0 \leq n\Delta t \leq T. \quad (5.6)$$



Die Stabilitätsdefinition (5.6) wird als Lax-Richtmeyer-Stabilität bezeichnet. Sie sichert die Konvergenz des Verfahrens, jedoch erlaubt die Stabilitätsdefinition nach Lax-Richtmeyer ein unphysikalisches Ansteigen der Lösung mit der Zeit für endliche Gitterschrittweiten  $\Delta$ . Diese Problematik wird z.B. in [27, 28] diskutiert. Da dieses Verhalten für die numerische Lösung der Maxwell'schen Gleichungen über große Zeitintervalle unakzeptabel ist, wird im folgenden die strengere als strikte Stabilität bezeichnete Bedingung betrachtet [29]

$$\|\mathbf{y}^{(n+1)}\|_{ht} \leq \|\mathbf{y}^{(n)}\|_{ht} \quad \forall n \geq 0. \quad (5.7)$$

Strikte Stabilität für die Maxwell'schen Gleichungen ist äquivalent zu der Eigenschaft

$$\|\mathbf{G}\|_{ht} \leq 1 \quad (5.8)$$

der Propagationsmatrix des Einschrittverfahrens. Da alle vorgestellten semidiskreten Verfahren eine räumliche Stabilitätsbedingung im Sinne von

$$\frac{d}{dt} \|\mathbf{y}\|_h \leq 0 \quad (5.9)$$

erfüllen, hängt die strikte Stabilität der volldiskreten Gleichungen ausschließlich vom gewählten Einschrittverfahren zur Zeitintegration ab.

## 5.1 Konstruktion mittels Taylorreihen

Formal kann die Lösung zum Zeitpunkt  $t^{(n+1)}$  durch die Lösung zum Zeitpunkt  $t^{(n)}$  und ihre zeitlichen Ableitungen mittels der Taylorreihenentwicklung

$$\mathbf{y}^{(n+1)} = \sum_{k=0}^M \frac{1}{k!} \left( \Delta t \frac{d}{dt} \right)^k \mathbf{y}^{(n)} + \mathcal{O}(\Delta t^{M+1}) \quad (5.10)$$

dargestellt werden. Um ein Einschrittverfahren zu erhalten, werden gemäß der dem Problem zugrunde liegenden PDE, die zeitlichen Ableitungen durch diskretisierte räumliche Ableitungen ersetzt. Dieses Vorgehen wird in der Literatur als Lax-Wendroff- oder Cauchy-Kowalewski-Technik bezeichnet [16]. Für den Fall, dass die semidiskrete Gleichung (5.1) für die Substitution der zeitlichen Ableitung benutzt wird, ergibt sich

$$\mathbf{y}^{(n+1)} = \sum_{k=0}^M \frac{1}{k!} (\Delta t \mathbf{A})^k \mathbf{y}^{(n)} + \mathcal{O}(\Delta t^{M+1}), \quad (5.11)$$

was der abgebrochenen Entwicklung des Matrixexponentials (5.3) entspricht. Unter der Voraussetzung, dass der Courantparameter  $\sigma$  festgehalten wird, kann der Diskretisierungsfehler des Verfahrens gänzlich in  $\Delta t$  oder, durch die Beziehung

$c_0 \Delta t = \sigma \Delta$ , in  $\Delta$  ausgedrückt werden. Dies ermöglicht die Ordnung der räumlichen Operatoren für jede Potenz von  $\Delta t$  in der Taylorreihe (5.11) sukzessive zu verringern, ohne die Ordnung des Verfahrens zu reduzieren.

Falls die semidiskreten Gleichungen die Form

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \widehat{\mathbf{h}} &= \mathbf{A}_1 \widehat{\mathbf{e}}, \\ \frac{d}{dt} \widehat{\mathbf{e}} &= \mathbf{A}_2 \widehat{\mathbf{h}} \end{aligned} \quad (5.12)$$

haben, können die um die Zeitpunkt  $t^{(n)}$  bzw.  $t^{(n+1/2)}$  symmetrischen Taylorreihenentwicklungen

$$\begin{aligned} \widehat{\mathbf{h}}^{(n+1/2)} - \widehat{\mathbf{h}}^{(n-1/2)} &= \mathbf{A}_1 \sum_{k=0}^M \frac{\Delta t^{2k+1}}{(2k+1)! 2^{2k}} (\mathbf{A}_2 \mathbf{A}_1)^k \widehat{\mathbf{e}}^{(n)} + \mathcal{O}(\Delta t^{2M+1}), \\ \widehat{\mathbf{e}}^{(n+1)} - \widehat{\mathbf{e}}^{(n)} &= \mathbf{A}_2 \sum_{k=0}^M \frac{\Delta t^{2k+1}}{(2k+1)! 2^{2k}} (\mathbf{A}_1 \mathbf{A}_2)^k \widehat{\mathbf{h}}^{(n+1/2)} + \mathcal{O}(\Delta t^{2M+1}) \end{aligned} \quad (5.13)$$

benutzt werden, um Leap-Frog-Verfahren höherer Ordnung zu konstruieren [12].

### 5.1.1 Methode der Finiten Integration

#### Stabilisiertes Leap-Frog-Verfahren

Ausgangspunkt für die Entwicklung einer stabilisierten Leap-Frog-Methode (S-LF-Methode) ist das in [12] untersuchte (2,4)-LF-Verfahren. Der Stabilitätsbereich des (2,4)-LF-Verfahrens für FIT ist größer als der des LF-Verfahrens, jedoch erlaubt das (2,4)-LF-Verfahren keine Kompensation des räumlichen mit dem zeitlichen Fehler. Um ein Verfahren herzuleiten, welches entlang der z-Richtung eine Kompensation der Fehler erlaubt, wird das Verfahren

$$\begin{aligned} \widehat{\mathbf{h}}^{(n+1/2)} &= \widehat{\mathbf{h}}^{(n-1/2)} - \Delta t \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C}' \widehat{\mathbf{e}}^{(n)}, \\ \widehat{\mathbf{e}}^{(n+1)} &= \widehat{\mathbf{e}}^{(n)} + \Delta t \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{C}'^T \widehat{\mathbf{h}}^{(n+1/2)} \end{aligned} \quad (5.14)$$

mit dem modifizierten Rotationsoperator

$$\mathbf{C}' := \mathbf{C} - \frac{\tau}{24} \Delta t^2 \mathbf{C} \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{C}_t^T \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} \quad (5.15)$$

eingeführt. Im Gegensatz zu dem (2,4)-LF-Verfahren enthält der Korrekturterm zum LF-Verfahren auch den, durch

$$\mathbf{C}_t := \begin{pmatrix} 0 & 0 & \mathbf{P}_y \\ 0 & 0 & -\mathbf{P}_x \\ -\mathbf{P}_y & \mathbf{P}_x & 0 \end{pmatrix} \quad (5.16)$$

definierten transversalen Anteil des Rotationsoperator  $\mathbf{C}$  und ist mit einem freien Parameter  $\tau$  versehen. Da der transversale Rotationsoperator  $\mathbf{C}_t$  angewandt auf ein

nur in longitudinale Richtung variiertes Feld verschwindet, ist die Dispersionsbeziehung für longitudinal propagierende Wellen identisch mit der des LF-Verfahrens. Ein weiterer Unterschied im Vergleich zum (2,4)-Verfahrens besteht darin, dass die Konsistenz-Ordnung des räumlichen Operators des Korrekturterms  $\mathcal{O}(1)$  ist und somit ist die Ordnung des Verfahrens für alle Werte von  $\tau$  auf zwei beschränkt. Eine Verallgemeinerung der Methode durch die entsprechende Modifikation von LF-Verfahren höherer Ordnung ist möglich, jedoch wird sie im Rahmen dieser Arbeit nicht weiter verfolgt.

Durch eine geeignete Wahl des Parameters  $\tau$  kann, wie in dem Abschnitt 5.5 gezeigt wird, die Stabilität der Methode für einen Courantparameter von  $\sigma = 1$  erzwungen werden.

### 5.1.2 Finite Volumen Methoden

#### Das Lax-Wendroff-Verfahren

Die Lax-Wendroff-FVM (LW-FVM) ist ein klassisches Verfahren (siehe [24]) und wird zur Integration der Subsysteme der gesplitteten FVM mit dem Upwind-Fluss benötigt. Seine Propagations-Matrix ist durch die abgebrochene und modifizierte Taylorreihenentwicklung von zweiter Ordnung Genauigkeit in der Zeit

$$\mathbf{G}^{\text{LW}}(\Delta t) := \mathbf{1} + \Delta t \mathbf{A}_U \left( \mathbf{1} + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{A}'_U \right) \quad (5.17)$$

gegeben. Die Systemmatrix  $\mathbf{A}'_U$  wird aus der Systemmatrix  $\mathbf{A}_U$  erhalten, indem die Steigungen der rekonstruierten Funktion zu Null gesetzt werden. Dies ändert nicht die formale Ordnung des Verfahrens für einen fixierten Courantparameter. Für den Fall, dass ein Subsystem mit der LW-FVM integriert wird, wird die Propagationsmatrix  $\mathbf{G}$  mit einem Index versehen. Falls z.B. der Algorithmus mit einer als  $\mathbf{A}_{U,x}$  bezeichneten System-Matrix ausgeführt wird, ist die Notation für die Propagationsmatrix  $\mathbf{G}_x^{\text{LW}}(\Delta t)$ .

## 5.2 Konstruktion durch Split-Operator-Verfahren

Der Grundgedanke von auf Split-Operator-Verfahren basierenden Methoden zur numerischen Integration der semidiskreten Gleichungen ist es, die zeitliche Entwicklung des Systems von (5.1) durch die zeitliche Entwicklung von einfacher zu lösenden Systemen zu ersetzen. Dies wird am einfachsten veranschaulicht durch die Approximation der Lösung von (5.1) durch die zwei Teilsysteme

$$\frac{d}{dt} \mathbf{y}_1 = \mathbf{A}_1 \mathbf{y}_1 \quad (5.18)$$

und

$$\frac{d}{dt} \mathbf{y}_2 = \mathbf{A}_2 \mathbf{y}_2. \quad (5.19)$$

Dabei ist die einzige Einschränkung an die Teilsysteme, dass

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_1 + \mathbf{A}_2 \quad (5.20)$$

ist. Der kompliziertere Fall der Zerlegung in  $n$ -Teilsysteme kann durch die rekursive Anwendung der Zerlegung in zwei Teilsysteme behandelt werden. Es stellt sich somit die Frage, wie anhand von Lösungen der Teilsysteme eine approximative Lösung des Systems (5.1) erhalten werden kann. Zwei einfache Möglichkeiten zur Konstruktion von Verfahren mit zweiter Ordnung Genauigkeit in der Zeit, bilden die von Strang in [30] eingeführten Split-Operator-Methoden:

$$\exp(\mathbf{A}\Delta t) = \exp(\mathbf{A}_1\Delta t/2) \exp(\mathbf{A}_2\Delta t) \exp(\mathbf{A}_1\Delta t) + \mathcal{O}(\Delta t^3), \quad (5.21)$$

$$\exp(\mathbf{A}\Delta t) = \frac{1}{2} (\exp(\mathbf{A}_1\Delta t) \exp(\mathbf{A}_2\Delta t) + \exp(\mathbf{A}_2\Delta t) \exp(\mathbf{A}_1\Delta t)) + \mathcal{O}(\Delta t^3) \quad (5.22)$$

Gleichung (5.21) wird im folgenden als Strang-1 Split-Operator-Methode und Gleichung (5.22) als Strang-2 Split-Operator-Methode bezeichnet. Abschließend wird noch eine alternative Formulierung für das Strang-1 Split-Operator-Verfahren benötigt,

$$\exp(\mathbf{A}_2\Delta t) = \exp(\mathbf{A}_1\Delta t) \exp(\mathbf{A}_2\Delta t) \exp(\mathbf{A}_2\Delta t) \exp(\mathbf{A}_1\Delta t) + \mathcal{O}(\Delta t^3). \quad (5.23)$$

Bei der Verwendung der exakten Matrixexponentiale für die Lösung der Subsysteme ist sie mathematisch äquivalent zu (5.21), sobald die Matrixexponentiale jedoch durch eine Integrationsmethode ersetzt werden ist dies nicht mehr der Fall.

Die in (5.21), (5.22) und (5.23) im Vergleich zur exakten Zeitentwicklung gemachten Fehler werden als Split-Fehler bezeichnet. Die Split-Fehler sind unabhängig von der gewählten Lösungsmethode für die Subsysteme (siehe [31]). Sie verschwinden nur, falls die Systemmatrizen der beiden Subsysteme kommutieren

$$[\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2] := \mathbf{A}_1\mathbf{A}_2 - \mathbf{A}_2\mathbf{A}_1 = 0. \quad (5.24)$$

### 5.2.1 Methode der Finiten Integration

#### Das Verlet-Leap-Frog-Verfahren

Das Verlet-Leap-Frog-Verfahren (VLF Verfahren) dient als Grundlage für die neu entwickelten Split-Operator-Verfahren und wird darum zuerst diskutiert. Für die FIT ist das VLF Verfahren gemäß (C.2) durch die Wahl

$$\mathbf{K}_1 = -\mathbf{M}_\mu^{-1}\mathbf{C}, \quad \mathbf{K}_2 = \mathbf{M}_\varepsilon^{-1}\mathbf{C}^T \quad (5.25)$$

für die Systemmatrix gegeben. Die explizite Form des Algorithmus ist

$$\widehat{\mathbf{h}}^{(*)} = \widehat{\mathbf{h}}^{(n)} - \frac{\Delta t}{2} \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} \widehat{\mathbf{e}}^{(n)}, \quad (5.26)$$

$$\widehat{\mathbf{e}}^{(n+1)} = \widehat{\mathbf{e}}^{(n)} + \Delta t \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \widetilde{\mathbf{C}} \widehat{\mathbf{h}}^{(*)}, \quad (5.27)$$

$$\widehat{\mathbf{h}}^{(n+1)} = \widehat{\mathbf{h}}^{(*)} - \frac{\Delta t}{2} \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} \widehat{\mathbf{e}}^{(n+1)}. \quad (5.28)$$

Dies entspricht der Propagationsmatrix

$$\mathbf{G}^{\text{VLF}}(\Delta t) := \begin{pmatrix} 1 - \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \widetilde{\mathbf{C}} & -\Delta t \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} + \frac{\Delta t^3}{4} \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \widetilde{\mathbf{C}} \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} \\ \Delta t \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \widetilde{\mathbf{C}} & 1 - \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \widetilde{\mathbf{C}} \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} \end{pmatrix}. \quad (5.29)$$

Für den Fall, dass spezielle Rotationsmatrizen verwendet werden, wird die Propagationsmatrix mit einem Index versehen. Falls z.B. der Algorithmus mit einer als  $\mathbf{C}_x$  bezeichneten Rotationsmatrix ausgeführt wird, ist die Notation für die Propagationsmatrix  $\mathbf{G}_x^{\text{VLF}}(\Delta t)$ .

### Split-Operator-Verfahren in drei Raumrichtungen

Das naheliegende Split-Operator-Verfahren für die Maxwell'schen Gleichungen ist eine Aufspaltung der Rotationsmatrizen bezüglich der räumlichen Richtung der in ihnen vorkommenden  $\mathbf{P}$ -Matrizen in die Anteile

$$\mathbf{C}_x := \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\mathbf{P}_x \\ 0 & \mathbf{P}_x & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{C}_y := \begin{pmatrix} 0 & 0 & \mathbf{P}_y \\ 0 & 0 & 0 \\ -\mathbf{P}_y & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{C}_z := \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{P}_z & 0 \\ \mathbf{P}_z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.30)$$

Aus ihnen werden die Systemmatrizen

$$\mathbf{A}_x := \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C}_x \\ \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{C}_x & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}_y := \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C}_y \\ \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{C}_y & 0 \end{pmatrix} \quad (5.31)$$

und

$$\mathbf{A}_z := \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C}_z \\ \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{C}_z & 0 \end{pmatrix} \quad (5.32)$$

für die Teilsysteme konstruiert. Jedes Teilsystem zerfällt für sich in zwei unabhängige, eindimensionale Gleichungen. Jede der eindimensionalen Gleichungen wird durch ein VLF Verfahren gelöst. Die approximative Lösung für das gesamte System wird durch die Strang-1 Split-Operator-Methode (5.23) auf die Lösung der Teilsysteme zurückgeführt. Die Propagationsmatrix des Verfahrens ergibt sich zu

$$\mathbf{G}(2\Delta t) = \mathbf{G}_x^{\text{VLF}}(\Delta t) \mathbf{G}_y^{\text{VLF}}(\Delta t) \mathbf{G}_z^{\text{VLF}}(\Delta t) \mathbf{G}_z^{\text{VLF}}(\Delta t) \mathbf{G}_y^{\text{VLF}}(\Delta t) \mathbf{G}_x^{\text{VLF}}(\Delta t). \quad (5.33)$$

### Split-Operator-Verfahren in longitudinal und transversale Raumrichtung

Ein weiteres räumliches Split-Operator-Verfahren erhält man, falls die Rotationsmatrix nur in einen Anteil mit  $\mathbf{P}$ -Matrizen in die  $z$ -Richtung,  $\mathbf{C}_z$  aus Gleichung (5.30), und die zu ihr transversalen Richtungen aus Gleichung (5.16) aufgespalten wird. Aus ihnen werden die zwei Teilsysteme  $\mathbf{A}_z$ , siehe (5.32), und

$$\mathbf{A}_t := \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C}_t \\ \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{C}_t & 0 \end{pmatrix} \quad (5.34)$$

geformt. Die approximative Lösung für das gesamte System wird durch die Strang-1 Split-Operator-Methode (5.21) und unter Verwendung des VLF Verfahrens zur Lösung der Teilsysteme gewonnen. Die Propagationsmatrix für das System lautet dann

$$\mathbf{G}(\Delta t) = \mathbf{G}_t^{\text{VLF}}(\Delta t/2) \mathbf{G}_z^{\text{VLF}}(\Delta t) \mathbf{G}_t^{\text{VLF}}(\Delta t/2). \quad (5.35)$$

### Algebraisches Split-Operator-Verfahren

Eine formal von den Koordinaten unabhängige Aufteilung der Rotationsmatrix ist in [32] dargestellt, dort dient sie zur Herleitung von einem absolut stabilen Algorithmus für die Maxwellschen Gleichungen. Der Rotationsoperator wird in die Anteile

$$\mathbf{C}_+ := \begin{pmatrix} 0 & 0 & \mathbf{P}_y \\ \mathbf{P}_z & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{P}_x & 0 \end{pmatrix} \quad (5.36)$$

und

$$\mathbf{C}_- := \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{P}_z & 0 \\ 0 & 0 & -\mathbf{P}_x \\ -\mathbf{P}_y & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.37)$$

zerlegt. Aus ihnen werden die zwei Teilsysteme

$$\mathbf{A}_- := \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C}_- \\ \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{C}_- & 0 \end{pmatrix} \quad (5.38)$$

und

$$\mathbf{A}_+ := \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C}_+ \\ \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{C}_+ & 0 \end{pmatrix} \quad (5.39)$$

geformt. Das semidiskrete Teilsystem für  $\mathbf{A}_-$  zerfällt in die drei unabhängigen Gleichungen

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{h}}_x \\ \hat{\mathbf{e}}_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{P}_y \\ \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{P}_y^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{h}}_x \\ \hat{\mathbf{e}}_z \end{pmatrix}, \quad (5.40)$$

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{h}}_z \\ \hat{\mathbf{e}}_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{P}_x \\ \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{P}_x^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{h}}_z \\ \hat{\mathbf{e}}_y \end{pmatrix}, \quad (5.41)$$

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{h}}_y \\ \widehat{\mathbf{e}}_x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{P}_z \\ \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{P}_z^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{h}}_y \\ \widehat{\mathbf{e}}_x \end{pmatrix}. \quad (5.42)$$

Auch das semidiskrete System für  $\mathbf{A}_+$  zerfällt in die drei linear unabhängige Gleichungen

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{h}}_z \\ \widehat{\mathbf{e}}_x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{P}_y \\ -\mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{P}_y^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{h}}_z \\ \widehat{\mathbf{e}}_x \end{pmatrix}, \quad (5.43)$$

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{h}}_y \\ \widehat{\mathbf{e}}_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{P}_x \\ \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{P}_x^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{h}}_y \\ \widehat{\mathbf{e}}_z \end{pmatrix}, \quad (5.44)$$

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{h}}_x \\ \widehat{\mathbf{e}}_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{P}_z \\ \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{P}_z^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{h}}_x \\ \widehat{\mathbf{e}}_y \end{pmatrix}. \quad (5.45)$$

Die Lösung des Systems  $\mathbf{A}$  wird durch die Strang-2 Split-Operator-Methode (5.22) auf die Lösung der Teilsysteme zurückgeführt. Die Teilsysteme (5.38) und (5.39) zerfallen wiederum in unabhängige eindimensionale Gleichungen, von denen jede mit einer VLF-Methode integriert wird. Die Propagationsmatrix dieser Methode, die als Plus-Minus-Verlet-Leap-Frog-Methode (PM-VLF-Methode) bezeichnet wird, ist

$$\mathbf{G}_{+-}(\Delta t) = \frac{1}{2} (\mathbf{G}_+^{\text{VLF}}(\Delta t) \mathbf{G}_-^{\text{VLF}}(\Delta t) + \mathbf{G}_-^{\text{VLF}}(\Delta t) \mathbf{G}_+^{\text{VLF}}(\Delta t)). \quad (5.46)$$

## 5.2.2 Finite Volumen Methoden

### Split-Operator-Verfahren in drei Raumrichtungen für die Finite-Volumen-Methode mit Upwind-Fluss

Um die durch die Systemmatrix (3.38) definierte semidiskrete Gleichung zu lösen, wird die Systemmatrix in die drei, den jeweiligen Koordinaten-Richtungen entsprechenden, Systemmatrizen

$$\mathbf{A}_{U,\alpha} := \begin{pmatrix} \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{U}_{h,\alpha} & -\mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C}_{e,\alpha} \\ \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{C}_{h,\alpha} & \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{U}_{e,\alpha} \end{pmatrix}, \quad \alpha \in [x, y, z] \quad (5.47)$$

aufgeteilt. Die Teilmatrizen in (5.47) für den Fall  $\alpha = x$  lauten

$$\mathbf{C}_{e,x} := \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\mathbf{P}_{e,x} \\ 0 & \mathbf{P}_{e,x} & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{C}_{h,x} := \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\mathbf{P}_{h,x} \\ 0 & \mathbf{P}_{h,x} & 0 \end{pmatrix}$$

sowie

$$\mathbf{U}_{e,x} := \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{U}_{e,x} & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{U}_{e,x} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{U}_{h,x} := \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{U}_{h,x} & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{U}_{h,x} \end{pmatrix},$$

mit analogen Ausdrücken für die Fälle  $\alpha = y$  und  $\alpha = z$ . Die approximative Lösung für das System wird durch die Strang-1 Split-Operator-Methode (5.23) auf die Lösung der Teilsysteme zurückgeführt. Die Propagationsmatrix des Verfahrens ergibt sich zu

$$\mathbf{G}(2\Delta t) = \mathbf{G}_{U,x}^{\text{LW}}(\Delta t) \mathbf{G}_{U,y}^{\text{LW}}(\Delta t) \mathbf{G}_{U,z}^{\text{LW}}(\Delta t) \mathbf{G}_{U,z}^{\text{LW}}(\Delta t) \mathbf{G}_{U,y}^{\text{LW}}(\Delta t) \mathbf{G}_{U,x}^{\text{LW}}(\Delta t). \quad (5.48)$$

### Das Verlet-Leap-Frog-Verfahren für die Finite-Volumen-Methode mit zentralem-Fluss

Das VLF Verfahren dient hier zur dissipationsfreien Integration der durch das semidiskrete System (3.34) beschriebenen FVM mit zentralem Fluss. Das VLF Verfahren ist gemäß (C.2) und (3.34) durch die Wahl

$$\mathbf{K}_1 = -\mathbf{M}_\mu^{-1}\mathbf{C}, \quad \mathbf{K}_2 = \mathbf{M}_\varepsilon^{-1}\mathbf{C} \quad (5.49)$$

für die Systemmatrix gegeben. Die explizite Form des Algorithmus ist

$$\mathbf{h}^{(*)} = \mathbf{h}^{(n)} - \frac{\Delta t}{2} \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} \mathbf{e}^{(n)}, \quad (5.50)$$

$$\mathbf{e}^{(n+1)} = \mathbf{e}^{(n)} + \Delta t \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{C} \mathbf{h}^{(*)}, \quad (5.51)$$

$$\mathbf{h}^{(n+1)} = \mathbf{h}^{(*)} - \frac{\Delta t}{2} \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} \mathbf{e}^{(n+1)}. \quad (5.52)$$

Dies entspricht der Propagationsmatrix

$$\mathbf{G}_Z^{\text{VLF}}(\Delta t) := \begin{pmatrix} 1 - \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{C} & -\Delta t \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} + \frac{\Delta t^3}{4} \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{C} \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} \\ \Delta t \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{C} & 1 - \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{C} \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} \end{pmatrix}. \quad (5.53)$$

## 5.3 Volldiskrete Erhaltungssätze

### 5.3.1 Methode der Finiten Integration

#### Leap-Frog-Verfahren

Die erhaltene Energie für das LF-Schema ist durch

$$\mathcal{E}_h = \frac{1}{2} \left( \left\langle \widehat{\mathbf{h}}^{(n-1/2)}, \mathbf{M}_\mu \widehat{\mathbf{h}}^{(n-1/2)} \right\rangle + \left\langle \widehat{\mathbf{e}}^{(n)}, \mathbf{M}_\varepsilon \widehat{\mathbf{e}}^{(n)} \right\rangle - \Delta t \left\langle \widehat{\mathbf{h}}^{(n-1/2)}, \mathbf{C} \widehat{\mathbf{e}}^{(n)} \right\rangle \right) \quad (5.54)$$

gegeben [13]. Der volldiskrete Divergenzoperator  $\widetilde{\mathbf{S}}$  für die elektrische Flussdichte ist identisch mit dem der semidiskreten Gleichungen (3.3). Somit lautet die volldiskrete Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\mathbf{q}^{(n+1)} - \mathbf{q}^{(n)}}{\Delta t} + \widetilde{\mathbf{S}} \widehat{\mathbf{j}}^{(n+1/2)} = 0. \quad (5.55)$$



### Stabilisiertes Leap-Frog-Verfahren

Die erhaltene Energie für das S-LF-Schema ist durch

$$\mathcal{E}_h = \frac{1}{2} \left( \left\langle \widehat{\mathbf{h}}^{(n-1/2)}, \mathbf{M}_\mu \widehat{\mathbf{h}}^{(n-1/2)} \right\rangle + \left\langle \widehat{\mathbf{e}}^{(n)}, \mathbf{M}_\epsilon \widehat{\mathbf{e}}^{(n)} \right\rangle - \Delta t \left\langle \widehat{\mathbf{h}}^{(n-1/2)}, \mathbf{C}' \widehat{\mathbf{e}}^{(n)} \right\rangle \right) \quad (5.56)$$

gegeben. Der volldiskrete Divergenzoperator  $\widetilde{\mathbf{S}}$  für die elektrische Flussdichte ist identisch mit dem der semidiskreten Gleichungen (3.3). Somit ist die volldiskrete Kontinuitätsgleichung ebenfalls durch (5.55) gegeben.

### Verlet-Leap-Frog-Verfahren

Um die diskrete Energie zu erhalten, wird die Ähnlichkeitstransformation

$$\mathbf{B}_1 = \mathbf{M}_\mu^{1/2}, \quad \mathbf{B}_2 = \mathbf{M}_\epsilon^{1/2} \quad (5.57)$$

benutzt. Gemäß (C.8) ist die erhaltene, diskrete Energie

$$\mathcal{E}_h = \left\langle \widehat{\mathbf{h}}^{(n)}, \mathbf{M}_\mu \widehat{\mathbf{h}}^{(n)} \right\rangle + \left\langle \widehat{\mathbf{e}}^{(n)}, \mathbf{M}_\epsilon \widehat{\mathbf{e}}^{(n)} \right\rangle - \frac{\Delta t^2}{4} \left\langle \widehat{\mathbf{e}}^{(n)}, \mathbf{M}_\epsilon^{-1} \mathbf{C}^T \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} \widehat{\mathbf{e}}^{(n)} \right\rangle. \quad (5.58)$$

Der volldiskrete Divergenzoperator  $\widetilde{\mathbf{S}}$  für die elektrische Flussdichte ist identisch mit dem der semidiskreten Gleichungen (3.3). Die mit seiner Hilfe hergeleitete volldiskrete Kontinuitätsgleichung ergibt sich zu (5.55).

### Split-Operator-Verfahren in drei Raumrichtungen

Ein geschlossener Ausdruck für die erhaltene diskrete Energie ist im Rahmen dieser Arbeit nicht berechnet worden, ihre Existenz ist jedoch gesichert, da die Split-Operator-Methode symplektisch ist. Der, mit der in Anhang C.3 beschriebenen Methode berechnete, volldiskrete Divergenzoperator  $\widetilde{\mathbf{S}}_{xyz}$  für die elektrische Flussdichte ist unterschiedlich von  $\widetilde{\mathbf{S}}$  dem Divergenzoperator der semidiskreten Gleichungen (3.3) und lautet

$$\begin{aligned} \widetilde{\mathbf{S}}_{xyz} &:= \widetilde{\mathbf{S}} - \frac{\sigma^2}{8} (\mathbf{P}_x^T (\mathbf{P}_y^T \mathbf{P}_y + \mathbf{P}_z^T \mathbf{P}_z), \mathbf{P}_y^T \mathbf{P}_z^T \mathbf{P}_z, 0) \\ &\quad + \frac{\sigma^4}{64} (\mathbf{P}_x^T \mathbf{P}_y^T \mathbf{P}_y \mathbf{P}_z^T \mathbf{P}_z, 0, 0). \end{aligned} \quad (5.59)$$

Der Operator  $\widetilde{\mathbf{S}}_{xyz}$  ist von zweiter Ordnung Genauigkeit in Raum, er hängt vom gewählten Zeitschritt ab und konvergiert mit zweiter Ordnung in der Zeit gegen den semidiskreten Divergenzoperator  $\widetilde{\mathbf{S}}$ . Mit ihm kann die volldiskrete Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\mathbf{q}^{(n+1)} - \mathbf{q}^{(n)}}{\Delta t} + \widetilde{\mathbf{S}}_{xyz} \widehat{\mathbf{j}}^{n+1/2} = 0 \quad (5.60)$$

hergeleitet werden.

### Split-Operator-Verfahren in longitudinaler und transversaler Raumrichtung

Auch in diesem Fall ist ein geschlossener Ausdruck für die erhaltene diskrete Energie nicht berechnet worden, ihre Existenz ist jedoch gesichert da die Split-Operator-Methode ein Produkt von symplektischen Abbildungen ist.

Der mit der in Anhang C.3 beschriebenen Methode berechnete, volldiskrete Divergenzoperator  $\tilde{\mathbf{S}}_{LT}$  für die elektrische Flussdichte ist unterschiedlich von dem der semidiskreten Gleichungen (3.3),  $\tilde{\mathbf{S}}$ , und lautet

$$\tilde{\mathbf{S}}_{LT} := \tilde{\mathbf{S}} - \frac{\sigma^2}{4} (\mathbf{P}_x^T, \mathbf{P}_y^T, 0) \mathbf{P}_z^T \mathbf{P}_z. \quad (5.61)$$

Der Operator  $\tilde{\mathbf{S}}_{LT}$  ist von zweiter Ordnung Genauigkeit in Raum, er hängt vom gewählten Zeitschritt ab und konvergiert mit zweiter Ordnung in der Zeit gegen den semidiskreten Divergenzoperator  $\tilde{\mathbf{S}}$ . Mit ihm kann die volldiskrete Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\mathbf{q}^{(n+1)} - \mathbf{q}^{(n)}}{\Delta t} + \tilde{\mathbf{S}}_{LT} \hat{\mathbf{j}}^{n+1/2} = 0 \quad (5.62)$$

hergeleitet werden.

### Algebraisches Split-Operator-Verfahren

Für das PM-VLF-Schema ist keine Energie erhalten, da die in Sektion 5.4 durchgeführte Fourieranalyse des Verfahrens zeigt, dass innerhalb des Stabilitätsbereiches des Verfahrens es Richtungen gibt, für die Wellen gedämpft werden. Mit Hilfe des in Anhang C.3 beschriebenen systematischen Verfahrens kann gezeigt werden, dass kein volldiskreter Divergenzoperator für das PM-VLF-Schema existiert.

## 5.3.2 Finite Volumen Methoden

### Split-Operator-Verfahren in drei Raumrichtungen für den Upwind-Fluss

Die in Sektion 5.4 durchgeführte Fourieranalyse des XYZ-LW Schemas ergibt, dass das Schema innerhalb seines Stabilitätsbereiches dissipativ ist und somit keine Energie erhält. Die Nichtexistenz eines volldiskreten Divergenzoperators für das XYZ-LW-Schema kann mit dem im Anhang C.3 beschriebenen systematischen Verfahrens gezeigt werden.

### Verlet-Leap-Frog-Verfahren für den zentralen Fluss

Um die erhaltene diskrete Energie zu berechnen, wird die Ähnlichkeitstransformation

$$\mathbf{B}_1 = \mathbf{M}_\mu^{1/2}, \quad \mathbf{B}_2 = \mathbf{M}_\varepsilon^{1/2} \quad (5.63)$$

benutzt. Gemäß (C.8) ist die erhaltene, diskrete Energie durch

$$\mathcal{E}_h = \langle \hat{\mathbf{h}}^{(n)}, \mathbf{M}_\mu \hat{\mathbf{h}}^{(n)} \rangle + \langle \hat{\mathbf{e}}^{(n)}, \mathbf{M}_\varepsilon \hat{\mathbf{e}}^{(n)} \rangle - \frac{\Delta t^2}{4} \langle \hat{\mathbf{e}}^{(n)}, \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{C}^T \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} \hat{\mathbf{e}}^{(n)} \rangle \quad (5.64)$$

gegeben. Der volldiskrete Divergenzoperator  $\mathbf{S}$  für die elektrische Flussdichte ist identisch mit dem der semidiskreten Gleichungen (3.48). Somit lautet die volldiskrete Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\mathbf{q}^{(n+1)} - \mathbf{q}^{(n)}}{\Delta t} + \mathbf{S} \hat{\mathbf{j}}^{(n+1/2)} = 0. \quad (5.65)$$

## 5.4 Fourieranalyse der Verfahren

Unter den Voraussetzungen, dass ein homogenes Gitter mit Schrittweite  $\Delta$ , periodische Randbedingungen und ein homogenes Material vorliegen, o.B.d.A. sei Vakuum angenommen\*, können die vorgestellten Verfahren durch eine Fourieranalyse mit den Basisfunktionen

$$\mathbf{y}^{(n)} = \mathbf{y}^{(0)} \exp \left( i \left( \vec{k} \cdot \vec{x} - \tilde{\omega} \Delta t n \right) \right) \quad (5.66)$$

analysiert werden [7]. Die Größe  $\tilde{\omega}$  steht für die numerische Kreisfrequenz und  $\vec{k}$  für den diskreten Wellenvektor. Sie sind beide durch eine Dispersionsbeziehung miteinander verknüpft, die im folgenden als numerische Dispersionsbeziehung bezeichnet wird, um sie von der physikalischen Dispersionsbeziehung zu unterscheiden.

### 5.4.1 Methode der Finiten Integration

#### Leap-Frog- und Verlet-Leap-Frog-Verfahren

Die numerische Dispersionsbeziehung des LF und VLF Verfahrens sind identisch und durch

$$\sin^2 \left( \frac{\tilde{\omega} \Delta t}{2} \right) = \sigma^2 K_{LF3} \quad (5.67)$$

mit

$$K_{LF3} := \sin^2 \left( \frac{k_x \Delta}{2} \right) + \sin^2 \left( \frac{k_y \Delta}{2} \right) + \sin^2 \left( \frac{k_z \Delta}{2} \right) \quad (5.68)$$

---

\* Für andere Medien ist lediglich die Lichtgeschwindigkeit anzupassen.

gegeben [8]. Für Wellen, die entlang der  $z$ -Richtung propagieren, reduziert sich die Dispersionsbeziehung auf

$$\sin\left(\frac{\tilde{\omega}\Delta t}{2}\right) = \sigma^2 \sin^2\left(\frac{k_z\Delta}{2}\right). \quad (5.69)$$

Für  $\sigma = 1$  ermöglicht dies die dispersionsfreie Propagation dieser Wellen. Jedoch ist das Verfahren für diesen Courantparameter nicht stabil.

### Stabilisiertes Leap-Frog-Verfahren

Die numerische Dispersionsbeziehung für das S-LF Verfahren ergibt sich zu

$$\sin^2\left(\frac{\tilde{\omega}\Delta t}{2}\right) = \sigma^2 K_{LF3} \left(1 - \frac{\tau}{6} \sigma^2 \left(\sin^2\left(\frac{k_x\Delta}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{k_y\Delta}{2}\right)\right)\right)^2. \quad (5.70)$$

Der Parameter  $\tau$  soll so bestimmt werden, dass für  $\sigma = 1$  die numerische Kreisfrequenz  $\tilde{\omega}$  rein reell ist. Die in Abschnitt 5.5 angegebene Stabilitätsanalyse ergibt die Bedingung  $\tau \in [3, 3 + \sqrt{3}]$ . Aus der Minimierung des im Anhang gegebenen Fehlerfunctionals für die numerische Dispersionsbeziehung folgt, dass der optimale Wert  $\tau = 3$  ist. Für in  $z$ -Richtung propagierende Wellen reduziert sich die Dispersionsbeziehung auf (5.69).

### Split-Operator-Verfahren in drei Raumrichtungen

Die numerische Dispersionsbeziehung des XYZ-VLF Verfahrens ergibt sich zu

$$\sin^2(\tilde{\omega}\Delta t) = \sigma'^2 K_{LF3} - \frac{\sigma'^4}{4} K_4 + \frac{\sigma'^6}{4} K_6 - \frac{\sigma'^8}{16} K_8 + \frac{\sigma'^{10}}{16} K_{10} - \frac{\sigma'^{12}}{64} K_{12} \quad (5.71)$$

mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned}
\sigma' &:= \frac{\sigma}{2} \\
K_4 &:= \sin^4\left(\frac{k_x\Delta}{2}\right) + \sin^4\left(\frac{k_y\Delta}{2}\right) + \sin^4\left(\frac{k_z\Delta}{2}\right) + \\
&\quad 4\sin^2\left(\frac{k_x\Delta}{2}\right)\sin^2\left(\frac{k_y\Delta}{2}\right) + 4\sin^2\left(\frac{k_x\Delta}{2}\right)\sin^2\left(\frac{k_z\Delta}{2}\right) + 4\sin^2\left(\frac{k_y\Delta}{2}\right)\sin^2\left(\frac{k_z\Delta}{2}\right), \\
K_6 &:= \sin^4\left(\frac{k_x\Delta}{2}\right)\sin^2\left(\frac{k_y\Delta}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{k_x\Delta}{2}\right)\sin^4\left(\frac{k_y\Delta}{2}\right) + \sin^4\left(\frac{k_x\Delta}{2}\right)\sin^2\left(\frac{k_z\Delta}{2}\right) + \\
&\quad \sin^4\left(\frac{k_y\Delta}{2}\right)\sin^2\left(\frac{k_z\Delta}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{k_x\Delta}{2}\right)\sin^2\left(\frac{k_z\Delta}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{k_y\Delta}{2}\right)\sin^4\left(\frac{k_z\Delta}{2}\right) + \\
&\quad 4\sin^2\left(\frac{k_x\Delta}{2}\right)\sin^2\left(\frac{k_y\Delta}{2}\right)\sin^2\left(\frac{k_z\Delta}{2}\right), \\
K_8 &:= \sin^4\left(\frac{k_x\Delta}{2}\right)\sin^4\left(\frac{k_y\Delta}{2}\right) + \sin^4\left(\frac{k_x\Delta}{2}\right)\sin^4\left(\frac{k_z\Delta}{2}\right) + \sin^4\left(\frac{k_y\Delta}{2}\right)\sin^4\left(\frac{k_z\Delta}{2}\right) + \\
&\quad 4\sin^4\left(\frac{k_x\Delta}{2}\right)\sin^2\left(\frac{k_y\Delta}{2}\right)\sin^2\left(\frac{k_z\Delta}{2}\right) + 4\sin^2\left(\frac{k_x\Delta}{2}\right)\sin^4\left(\frac{k_y\Delta}{2}\right)\sin^2\left(\frac{k_z\Delta}{2}\right) + \\
&\quad 4\sin^2\left(\frac{k_x\Delta}{2}\right)\sin^2\left(\frac{k_y\Delta}{2}\right)\sin^4\left(\frac{k_z\Delta}{2}\right), \\
K_{10} &:= \sin^4\left(\frac{k_x\Delta}{2}\right)\sin^4\left(\frac{k_y\Delta}{2}\right)\sin^2\left(\frac{k_z\Delta}{2}\right) + \sin^4\left(\frac{k_x\Delta}{2}\right)\sin^2\left(\frac{k_y\Delta}{2}\right)\sin^4\left(\frac{k_z\Delta}{2}\right) + \\
&\quad \sin^2\left(\frac{k_x\Delta}{2}\right)\sin^4\left(\frac{k_y\Delta}{2}\right)\sin^4\left(\frac{k_z\Delta}{2}\right), \\
K_{12} &:= \sin^4\left(\frac{k_x\Delta}{2}\right)\sin^4\left(\frac{k_y\Delta}{2}\right)\sin^4\left(\frac{k_z\Delta}{2}\right).
\end{aligned}$$

Für in z-Richtung propagierende Wellen reduziert sich die Dispersionsbeziehung auf (5.69). Analoges gilt für die anderen Koordinatenrichtungen.

### Split-Operator-Verfahren für die longitudinale und transversale Raumrichtung

Die numerische Dispersionsbeziehung ergibt sich zu

$$\sin^2\left(\frac{\tilde{\omega}\Delta t}{2}\right) = \sigma^2 K_{\text{VLF3}} - \frac{\sigma^4}{4} K_{\text{LF2}} (4K_{\text{VLF1}} + K_{\text{VLF2}} (1 - \sigma^2 K_{\text{VLF1}})) \quad (5.72)$$

mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned}
K_{\text{LF1}} &:= \sin^2\left(\frac{k_z\Delta}{2}\right), \\
K_{\text{LF2}} &:= \sin^2\left(\frac{k_x\Delta}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{k_y\Delta}{2}\right)
\end{aligned} \quad (5.73)$$

und für in z-Richtung propagierende Wellen reduziert sich die Dispersionsbeziehung auf (5.69).

### Algebraisches Split-Operator-Verfahren

Das algebraische Split-Operator-Verfahren erlaubt zwar eine geschlossene Darstellung der Nullstellen seines charakteristischen Polynoms durch die Nullstellen eines

Polynoms dritten Grades, jedoch sind die mit Hilfe des Computer-Algebra-Systems Mathematica [33] erhaltenen Ausdrücke zu komplex, um ihre Eigenschaften analysieren zu können. Darum wird auf eine konkrete Angabe verzichtet und lediglich die numerisch berechnete Dispersionsbeziehung mit den der anderen Methoden verglichen. Für in  $z$ -Richtung propagierende Wellen reduziert sich die Dispersionsbeziehung auf (5.69), dies gilt ebenso für in  $x$ - und  $y$ -Richtung propagierenden Wellen.

### 5.4.2 Finite Volumen Methoden

#### Split Operator Verfahren in drei Raumrichtungen für den Upwind-Fluss

Die Dispersionsbeziehung des Verfahrens kann für den allgemeinen Fall nur numerisch berechnet werden.

#### Verlet-Leap-Frog-Verfahren für den zentralen Fluss

Die numerische Dispersionsbeziehung des VLF-ZFV-Verfahrens ist durch

$$\sin^2\left(\frac{\tilde{\omega}\Delta t}{2}\right) = \frac{3}{4}\sigma^2 \left( \left( \sin(\beta_x) - \frac{1}{6}\sin(2\beta_x) \right)^2 + \left( \sin(\beta_y) - \frac{1}{6}\sin(2\beta_y) \right)^2 + \left( \sin(\beta_z) - \frac{1}{6}\sin(2\beta_z) \right)^2 \right) \quad (5.74)$$

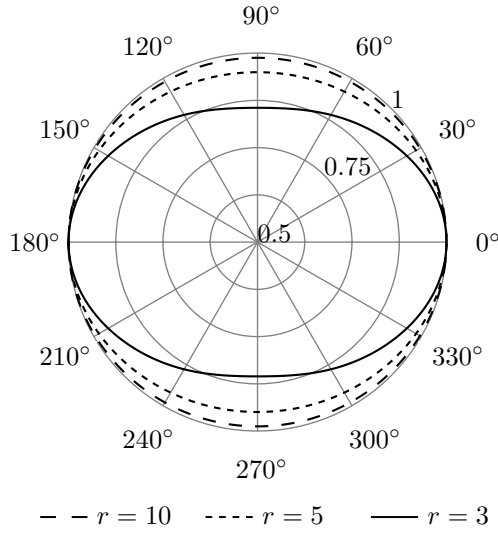
gegeben.

### 5.4.3 Graphische Gegenüberstellung der Dispersionseigenschaften

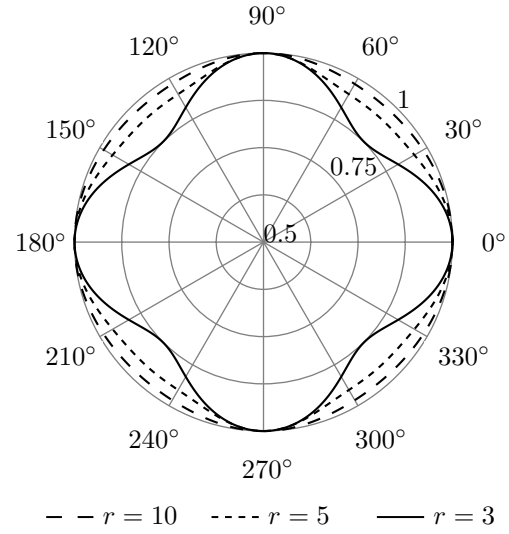
Um den numerischen Fehler der Schemen zu beurteilen, wird die auf Eins normierte physikalische Phasengeschwindigkeit (NPPG) mit der durch  $\nu := \tilde{\omega}/(ck)$  definierten numerischen Phasengeschwindigkeit (NNPG) verglichen. Um das Wachstum oder die Dämpfung eines Modes beurteilen zu können, wird der Amplifizierungsfaktor (AF)  $\zeta := \exp(\Im \tilde{\omega}\Delta t)$  eingeführt. Für stabile Schemen gilt  $\zeta \leq 1$ , falls  $\zeta = 1$  ist, so wird das Schema als neutral stabil, ansonsten als dissipativ bezeichnet. Da die NNPG und den AF nur von dem Verhältnis von Wellenlänge zu Gitterschrittweite und der Propagationsrichtung abhängen, wird der dimensionslose Wellenvektor  $\vec{\beta} := \Delta\vec{k}$  eingeführt. Für die graphische Darstellung wird er in Kugelkoordinaten mit der Parametrisierung

$$\beta_x = \beta \sin(\vartheta) \cos(\varphi), \quad \beta_y = \beta \sin(\vartheta) \sin(\varphi) \quad \text{und} \quad \beta_z = \beta \cos(\vartheta)$$

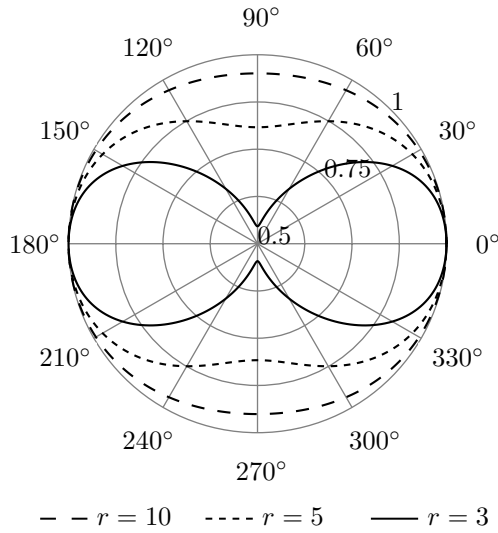
beschrieben.



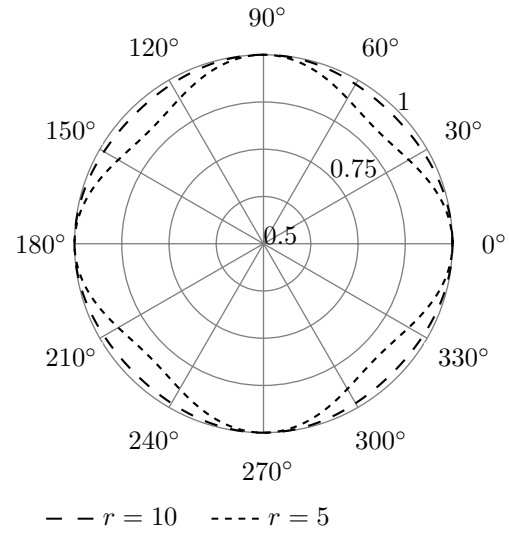
(c) LT-VLF Verfahren



(d) PM-VLF Verfahren

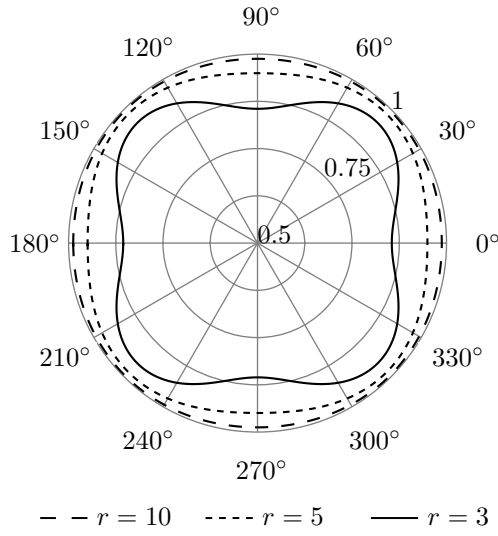


(e) S-LF Verfahren

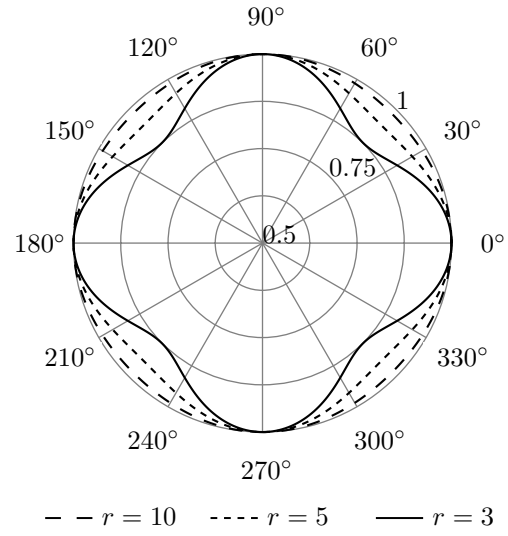


(f) XYZ-VLF Verfahren

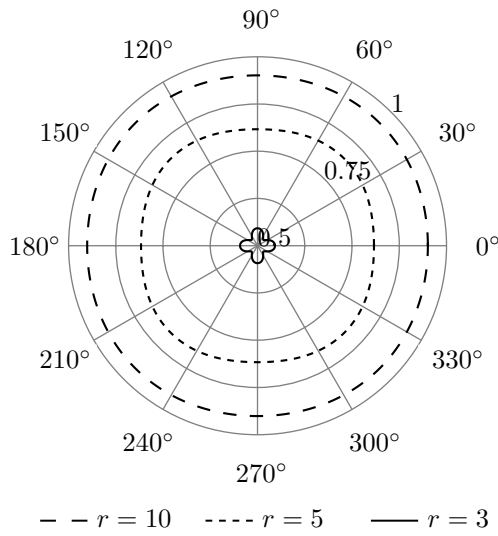
**Abb. 5.1:** Die normierte Phasengeschwindigkeit als Funktion von  $\vartheta$  für den konstant gehaltenen Wert  $\varphi = 0^\circ$ . Dies entspricht der Propagation in der XZ-Ebene.



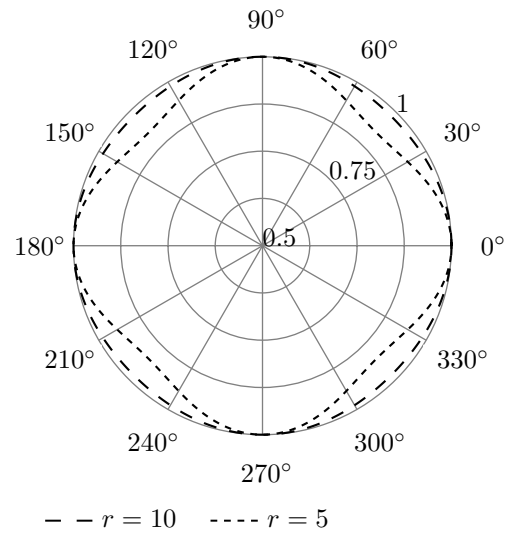
(a) LT-VLF Verfahren



(b) PM-VLF Verfahren



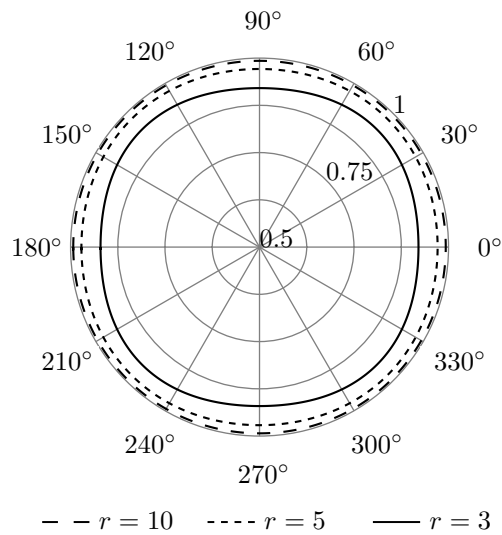
(c) S-LF Verfahren



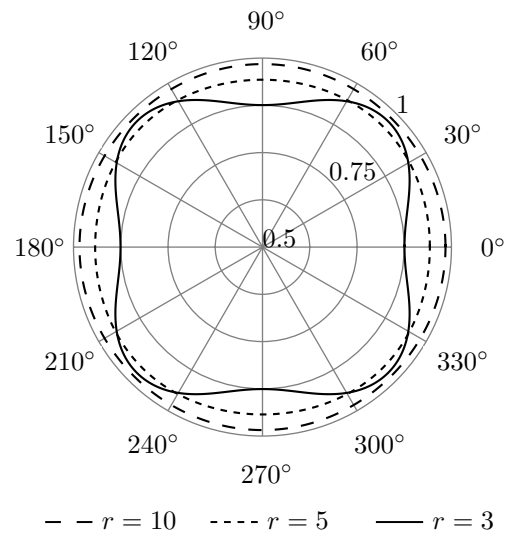
(d) XYZ-VLF Verfahren

**Abb. 5.2:** Die normierte Phasengeschwindigkeit als Funktion von  $\varphi$  für den konstant gehaltenen Wert  $\vartheta = 90^\circ$ . Dies entspricht der Propagation in der XY-Ebene.

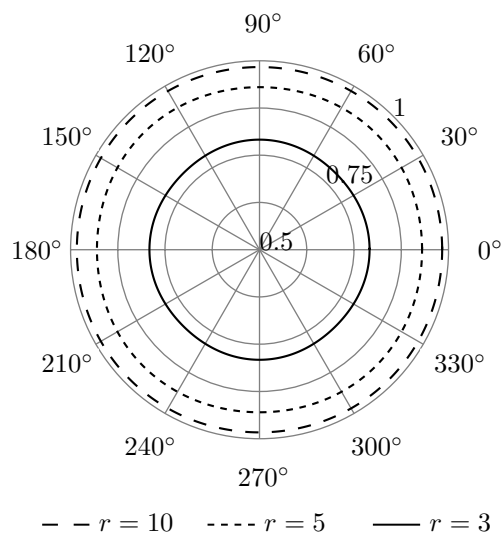




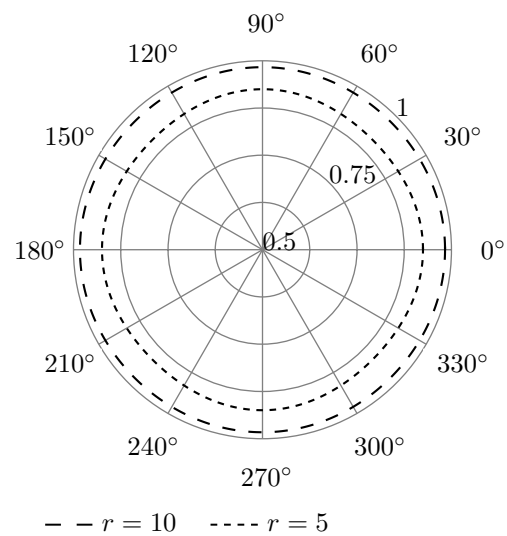
(a) LT-VLF Verfahren



(b) PM-VLF Verfahren

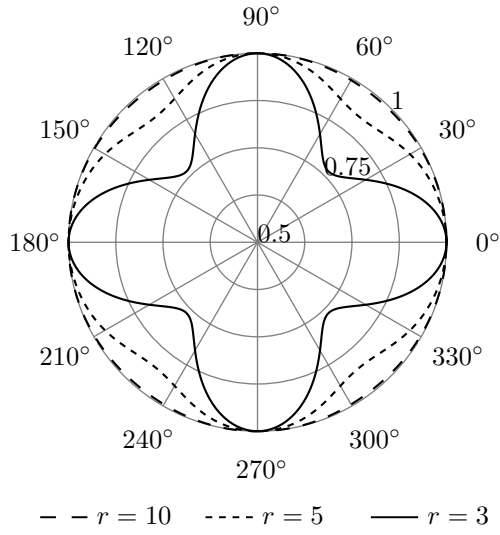
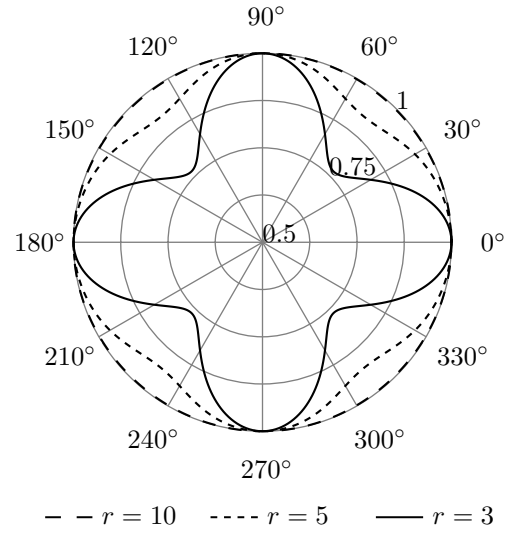
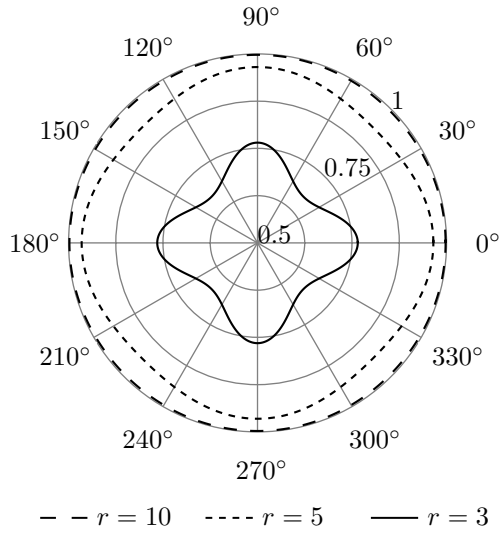


(c) S-LF Verfahren

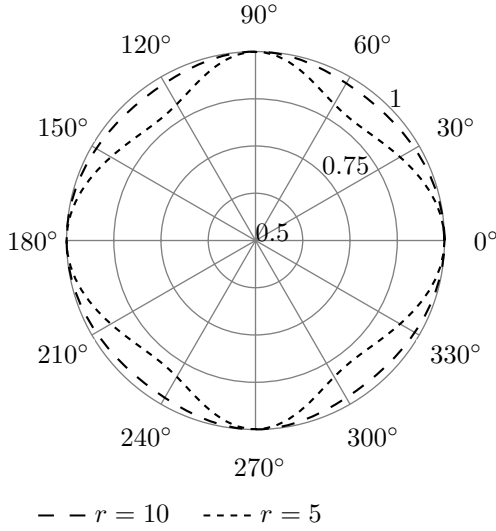


(d) XYZ-VLF Verfahren

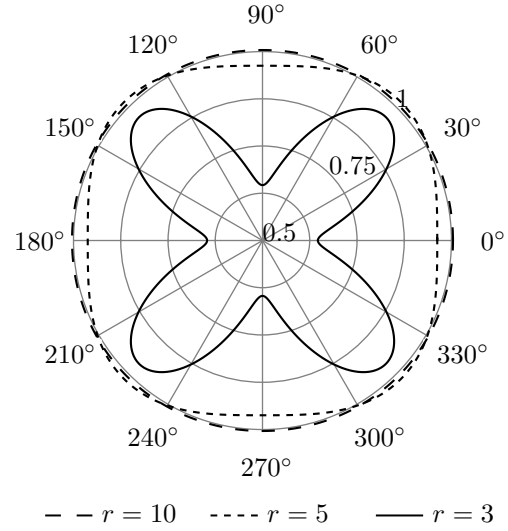
**Abb. 5.3:** Die normierte Phasengeschwindigkeit als Funktion von  $\varphi$  für den konstant gehaltenen Wert  $\vartheta = 45^\circ$ .

(a)  $\vartheta = 0 \dots 360^\circ$ ,  $\varphi = 0^\circ$ .(b)  $\varphi = 0 \dots 360^\circ$ ,  $\vartheta = 0^\circ$ .(c)  $\varphi = 0 \dots 360^\circ$ ,  $\vartheta = 45^\circ$ .

**Abb. 5.4:** Amplifizierungsfaktor des PM-LF Verfahrens für verschiedene Propagationsrichtungen und verschiedene Gitterpunkte pro Wellenlänge.

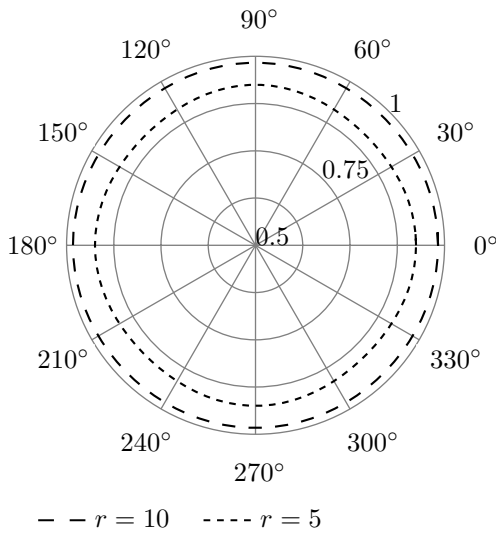


(a) XYZ-LW-UFV Verfahren

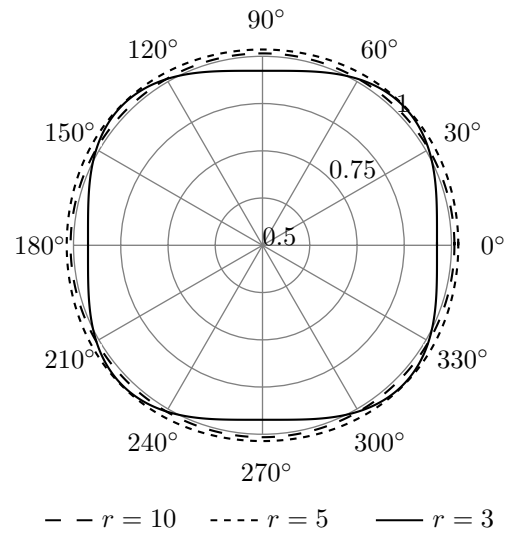


(b) VLF-ZFV

**Abb. 5.5:** Die normierte Phasengeschwindigkeit als Funktion von  $\vartheta$  für den konstant gehaltenen Wert  $\varphi = 0^\circ$ . Dies entspricht der Propagation in der XZ-Ebene.



(a) XYZ-LW-UFV



(b) VLF-ZFV

**Abb. 5.6:** Die normierte Phasengeschwindigkeit als Funktion von  $\varphi$  für den konstant gehaltenen Wert  $\vartheta = 45^\circ$ .

Es werden für drei repräsentativ gewählte Fälle die NNPG und, für das PM-VLF Verfahren, der AF aufgetragen. Die Courantparameter  $\sigma$  für die Verfahren ist so gewählt, dass sie an ihrer jeweiligen Stabilitätsgrenze arbeiten. Dies impliziert die Wahl des Courantparameters  $\sigma = 1$  für das LT-VLF, PM-VLF und S-LF Verfahren. Für das XYZ-VLF Verfahren ist der Courantparameter zu  $\sigma = 2$  gewählt. Bis auf das XYZ-VLF Verfahren wird für jedes Verfahren  $\beta = 2\pi/3, 2\pi/5$  und  $2\pi/10$  gewählt. Mit der Bezeichnung  $r$  für die Anzahl von Gitterpunkten pro Wellenlänge entspricht dies  $r = 3, 5$  und  $10$ . Da bei einem Courantparameter von  $\sigma = 2$  die Frequenzen der Wellenvektoren mit einer Auflösung von drei Gitterpunkten pro Wellenlänge, d.h.  $r = 3$ , oberhalb der vom Abtasttheorem gegebenen Grenze liegt, wird auf ihre Darstellung für das XYZ-VLF Verfahren verzichtet.

Abbildung 5.1 zeigt die NNPG der Verfahren in der XZ-Ebene. Das in Abb. 5.1(d) gezeigte PM-VLF Verfahren hat die besten Dispersionseigenschaften, gefolgt von dem in Abb. 5.1(f) dargestellten XYZ-VLF Verfahren. Beiden Verfahren ist gemein, dass ihre NNPG entlang der  $x$ - und  $z$ -Richtung mit der NPPG übereinstimmt. Dies ist nicht der Fall für das in Abb. 5.1(c) dargestellte LT-VLF Verfahren. Gleiches gilt für das in Abb. 5.1(c) dargestellte S-LF Verfahren. Die NNPG der beiden Verfahren stimmt lediglich entlang der  $z$ -Richtung mit der NPPG überein. Das LT-VLF Verfahren erlaubt für identische Gitterschrittweiten in  $x$ -,  $y$ - und  $z$ -Richtung lediglich eine exakte NNPG entlang der  $z$ -Richtung, da das in ihm verwendete zweidimensionale VLF Verfahren unterhalb seiner Stabilitätsgrenze verwendet wird. Das S-LF Verfahren zeigt für kurze Wellenlängen eine sehr große Abweichung der NNPG von der NPPG.

Die Abbildung 5.2 zeigt die NNPG der Verfahren in der XY-Ebene. Die NNPG des PM-VLF Verfahrens, siehe Abb. 5.2(b), und die des XYZ-VLF Verfahrens, siehe Abb. 5.2(d), sind aus Symmetriegründen identisch mit der NNPG aus der XZ-Ebene. Auch in dieser Ebene hat das PM-VLF Verfahren gefolgt von dem XYZ-VLF Verfahren die beste NNPG. Das LT-VLF Verfahren, dargestellt in Abb. 5.2(a), hat in dieser Ebene keine Richtung, in der seine NNPG mit der NPPG übereinstimmt. Der maximale Fehler in der NNPG ist vergleichbar mit dem des PM-VLF und XYZ-VLF Verfahrens. Das S-LF Verfahren in Abb. 5.2(c) hat für alle dargestellten Auflösungen und Richtungen den größten Fehler in der NNPG. Für den Fall  $r = 3$  liegt die Abweichung in der NNPG zwischen dem S-LF und allen anderen Verfahren bei ca. 40%, was signifikant schlechter ist.

Abbildung 5.3 zeigt die NNPG der Verfahren auf einer Kegelfläche mit Öffnungswinkel  $\vartheta = 45^\circ$  bezüglich der  $z$ -Achse. Für die Wahl dieser Fläche hat keines der dargestellten Verfahren eine Richtung in der seine NNPG mit NPPG übereinstimmt. Das in Abb. 5.3(a) dargestellte LT-VLF Verfahren hat von allen Verfahren die beste NNPG. Ihm folgt das in Abb. 5.3(b) dargestellte PM-VLF Verfahren.

Das in Abb. 5.3(c) dargestellte S-LF Verfahren und das in Abb. 5.3(d) dargestellte XYZ-VLF Verfahren haben ungefähr die gleiche NNPG. Beide Verfahren sind eindeutig schlechter als das PM-VLF Verfahren.

Abbildung 5.4(a) stellt den AF des PM-VLF Verfahrens dar. Aus Symmetriegründen hat das Verfahren für die XZ-Ebene in Abb. 5.4(a) und für die XY-Ebene in Abb. 5.4(a) den gleichen AF. Für beide Ebenen hat der AF ein Minimum für  $\varphi = 45^\circ, 135^\circ, 225^\circ$  und  $315^\circ$ . Entlang der Koordinatenachsen tritt keine Dämpfung auf. Der maximale Fehler im AF ist größer als der in der NNPG. Abbildung 5.4(a) zeigt den AF auf der Kegelfläche. Für Wellen die nur mit  $r = 3$  Gitterpunkten pro Wellenlänge aufgelöst werden, tritt eine starke Dämpfung auf.

Die Abb. 5.5 zeigt die NNPG der FVM in der XY-Ebene. Die NNPG der XYZ-LW-UFVM, siehe Abb. 5.5(a) ist praktisch identisch mit der der XYZ-VLF Methode und stimmt entlang der Koordinatenachsen mit der NPPG überein. Die in Abb. 5.5(b) dargestellte NNPG der ungesplitteten VLF-ZVFM ist immer größer als die NPPG in dieser Ebene und stimmt in keiner Richtung mit der NPPG überein. Die NNPG der FVM in der XZ-Ebene ist identisch mit der in der XY-Ebene und auf ihre Darstellung wird daher verzichtet.

Abbildung 5.6 zeigt die NNPG der FVM auf einer Kegelfläche mit Öffnungswinkel  $\vartheta = 45^\circ$  bezüglich der  $z$ -Achse. Für die Wahl dieser Fläche hat keines der dargestellten Verfahren eine Richtung in der seine NNPG mit NPPG übereinstimmt. Das in Abb. 5.6(b) dargestellte VLF-ZFVM Verfahren hat eine bessere NNPG als das in Abb. 5.6(a) dargestellte XYZ-VLF-FVM Verfahren.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass von den untersuchten Split-Operator Verfahren, die eine dispersionsfreie Integration entlang der  $z$ -Richtung zulassen, das LT-VLF Verfahren die besten Dispersionseigenschaften hat.

## 5.5 Stabilität

### 5.5.1 Methode der Finiten Integration

#### Leap-Frog-Verfahren

Die Stabilitätsanalyse der LF-Methode wird mittels der diskreten Energie (5.54) vorgenommen. Als Stabilitätsbedingung ergibt sich

$$\begin{pmatrix} \mathbf{M}_\mu & 0 \\ 0 & \mathbf{M}_\varepsilon \end{pmatrix} > \frac{\Delta t}{2} \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{C} \\ \mathbf{C}^T & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.75)$$

Die Bedingung kann, wie in [34], umgeschrieben werden als

$$\mathbf{1} - \frac{\Delta t^2}{4} \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{C}^T > 0. \quad (5.76)$$

Ein hinreichendes Kriterium [35] für die Stabilität der LF-Methode ist

$$\Delta t < \min_m \frac{1}{c_m} \left( \frac{1}{\Delta x_m^2} + \frac{1}{\Delta y_m^2} + \frac{1}{\Delta z_m^2} \right)^{-1/2}. \quad (5.77)$$

### Stabilisiertes Leap-Frog-Verfahren

Die Stabilitätsanalyse der S-LF-Methode wird mittels der diskreten Energie (5.56) vorgenommen. Als Stabilitätsbedingung ergibt sich

$$\begin{pmatrix} \mathbf{M}_\mu & 0 \\ 0 & \mathbf{M}_\varepsilon \end{pmatrix} > \frac{\Delta t}{2} \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{C}' \\ \mathbf{C}'^T & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.78)$$

Die Bedingung wird, wie in [34], umgeschrieben als

$$1 - \frac{\Delta t^2}{4} \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C}' \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{C}'^T > 0. \quad (5.79)$$

Um die Stabilität des Verfahrens in Abhängigkeit vom Parameter  $\tau$  weiter zu analysieren, wird die Bedingung (5.79) durch eine Fourieranalyse untersucht.

Die Stabilitätsbedingung (5.79) ergibt sich zu

$$0 > \sigma^2 (u + v) (-6 + \tau \sigma^2 u)^2 - 36 \quad (5.80)$$

mit

$$\begin{aligned} u &:= \sin^2\left(\frac{k_x \Delta}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{k_y \Delta}{2}\right), & u \in [0, 2] \\ v &:= \sin^2\left(\frac{k_z \Delta}{2}\right), & v \in [0, 1]. \end{aligned} \quad (5.81)$$

Die Stabilitätsbedingung (5.80) wird durch die strenge Abschätzung

$$(u + 1) \geq (u + v) \quad (5.82)$$

zu

$$0 > \sigma^2 (u + 1) (-6 + \tau \sigma^2 u)^2 - 36 \quad (5.83)$$

vereinfacht. Da der Parameter  $\tau$  so bestimmt werden soll, dass das Verfahren für  $\sigma = 1$  stabil ist, wird im nächsten Schritt  $\sigma = 1$  gesetzt und die Ungleichung als

$$0 > H(u, \tau) \quad (5.84)$$

mit der Funktion

$$H(u, \tau) := (u + 1)(-6 + \tau u)^2 - 36 \quad (5.85)$$

geschrieben. Da  $H$  ein Polynom dritten Grades in  $x$ , mit einer Nullstelle für  $u = 0$  und dem asymptotischen Verhalten  $H(-\infty) = -\infty$  sowie  $H(\infty) = \infty$  ist, ist die Ungleichung (5.84) nur dann erfüllt, wenn keine der beiden anderen Nullstellen

$$u_\pm(\tau) = \frac{12 - \tau \pm \sqrt{\tau(24 + \tau)}}{2\tau} \quad (5.86)$$

im Intervall  $u \in (0, 2)$  liegt. Da gilt  $u_-(\tau) < u_+(\tau)$ , reicht es aus, die Gleichungen  $w_-(\tau_0) = 0$  zu lösen und die Bedingung  $w_+(\tau_0) > 2$  zu kontrollieren, um die untere Grenze  $\tau_0 = 3$  zu erhalten. Die Berechnung der oberen Grenze geschieht durch Lösen der Gleichungen  $w_+(\tau_1) = 2$  und Kontrolle der Bedingung  $w_-(\tau_1) < 0$  und ergibt  $\tau_1 = 3 + \sqrt{3}$ , womit die Stabilitätsbedingung  $\tau \in [3, 3 + \sqrt{3}]$  bei einem Courantparameter von  $\sigma = 1$  bewiesen ist.

### Verlet-Leap-Frog-Verfahren

Die Stabilitätsanalyse der VLF-Methode kann mittels der diskreten Energie (5.58) vorgenommen werden. Als Stabilitätsbedingung ergibt sich zu

$$1 - \frac{\Delta t^2}{4} \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{C}^T \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} > 0 \quad (5.87)$$

und ist damit identisch zu der des LF-Verfahrens.

### Split-Operator-Verfahren in drei Raumrichtungen

Für das XYZ-VLF Verfahren kann kein Beweis für die Stabilität erbracht werden. Der Courantparameter  $\sigma = 1$  ist aber sicherlich die oberste Grenze, da ansonsten die VLF-Methoden für die Subsysteme instabil werden.

### Split-Operator-Verfahren in longitudinal und transversaler Raumrichtung

Der Stabilitätsbeweis für  $\sigma \leq 1$  wird durch eine Fourieranalyse gegeben. Aus der Dispersionsbeziehung (5.72) folgt, dass das Verfahren einen Amplifizierungsfaktor von Eins hat, solange gilt

$$K(u, v, \sigma) := \sigma^2 (u + v) - \frac{\sigma^4}{4} u (4v + u (1 - \sigma^2 v)) \in [0, 1] \quad (5.88)$$

mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned} u &:= \sin^2\left(\frac{k_x \Delta}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{k_y \Delta}{2}\right) \in [0, 2], \\ v &:= \sin^2\left(\frac{k_z \Delta}{2}\right) \in [0, 1]. \end{aligned} \quad (5.89)$$

Um die Bedingung (5.88) unter der Voraussetzung  $\sigma \in [0, 1]$  zu verifizieren, wird zuerst die Ungleichung

$$K(u, v, \sigma) \geq 0 \text{ für } \sigma \in [0, 1] \quad (5.90)$$

bewiesen.

$$\begin{aligned} \sigma^{-2} K(u, v, \sigma) &= \left(1 - \frac{\sigma^2}{4} (4v + u (1 - \sigma^2 v))\right) u + v \\ &\geq \left(1 - \frac{\sigma^2}{4} (4v + u (1 - \sigma^2 v))\right) u \\ &\geq \left(1 - \frac{\sigma^2}{4} (4v + 2 (1 - \sigma^2 v))\right) u \\ &= \left(1 - \frac{\sigma^2}{4} \left(2 + 4 \left(1 - \frac{\sigma^2}{2}\right) v\right)\right) u \\ &\geq \left(1 - \frac{\sigma^2}{4} \left(2 + 4 \left(1 - \frac{\sigma^2}{2}\right)\right)\right) u \end{aligned}$$

Aus der letzten Ungleichung folgt, dass eine hinreichende Bedingung für  $K(u, v, \sigma) \geq 0$  die Bedingung

$$1 \geq \frac{\sigma^2}{4} \left( 2 + 4 \left( 1 - \frac{\sigma^2}{2} \right) \right) \quad (5.91)$$

ist. Da die rechte Seite der Ungleichung (5.91) für  $\sigma = 0$  Null ist, für  $\sigma^2 \leq 3/2$  monoton steigend und für  $\sigma = 1$  exakt gleich Eins ist, ist die Bedingung (5.91) für  $\sigma \in [0, 1]$  immer erfüllt. Damit ist die Aussage (5.90) bewiesen.

Als letztes bleibt noch die Ungleichung

$$K(u, v, \sigma) \leq 1 \text{ für } \sigma \in [0, 1] \quad (5.92)$$

zu beweisen. Für  $\sigma = 0$  ist die Ungleichung (5.92) sicherlich erfüllt. Um zu sehen, ab welchem Wert von  $\sigma$

$$K(u, v, \sigma) = 1 \quad (5.93)$$

exakt gilt, wird (5.93) nach  $\sigma$  als Funktion von  $x$  und  $y$  aufgelöst,

$$\sigma_1^2(u) = \frac{2}{u}, \quad \sigma_2^2(v) = \frac{1}{v}. \quad (5.94)$$

Aus (5.94) und (5.89) folgt sofort die Bedingung  $\sigma \geq 1$ , womit (5.92) bewiesen ist.

## Algebraisches Split-Operator-Verfahren

Für das PM-VLF Verfahren kann kein Beweis für die Stabilität gegeben werden. Eine notwendige Bedingung ist sicherlich  $\sigma \leq 1$ , da ansonsten die VLF-Methoden für die Subsysteme instabil werden.

### 5.5.2 Finite Volumen Methoden

#### Split-Operator-Verfahren in drei Raumrichtungen für den Upwind-Fluss

Für das Verfahren kann kein Beweis für die Stabilität gegeben werden. Eine notwendige Bedingung ist sicherlich  $\sigma \leq 1$ , da ansonsten die LW-Methoden für die Subsysteme instabil werden.

#### Verlet-Leap-Frog-Verfahren für den zentralen Fluss

Die Stabilitätsanalyse der VLF-Methode kann mittels der diskreten Energie (5.64) vorgenommen werden. Als Stabilitätsbedingung ergibt sich zu

$$1 - \frac{\Delta t^2}{4} \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \mathbf{C} \mathbf{M}_\mu^{-1} \mathbf{C} > 0. \quad (5.95)$$



## 5.6 Berücksichtigung der Anregung

Um die Anregung zu berücksichtigen, wird die Lösung über ein Zeitintervall  $\Delta t$  gemäß (5.2) in eine homogene Lösung und eine inhomogene Lösung aufgeteilt. Der inhomogene Anteil wird durch

$$\int_{t_0}^{t_1} \exp(\mathbf{A}(t-t')) \mathbf{b}(t') dt' = \frac{1}{2} (1 + \exp(\mathbf{A}\Delta t)) \int_{t_0}^{t_1} \mathbf{b}(t') dt' + \mathcal{O}(\Delta t^3) \quad (5.96)$$

genähert. Mit der Bezeichnung

$$\bar{\mathbf{b}}^{(n)} := \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{b}(t') dt' \quad (5.97)$$

für die zeitgemittelte Anregung, kann ein Algorithmus von zweiter Ordnung Genauigkeit in der Zeit, der die Anregung berücksichtigt als

$$\begin{aligned} \mathbf{y}^{(*)} &= \mathbf{y}^{(n)} + \frac{\Delta t}{2} \bar{\mathbf{b}}^{(n)}, \\ \mathbf{y}^{(**)} &= \mathbf{G}(\Delta t) \mathbf{y}^{(*)}, \\ \mathbf{y}^{(n+1)} &= \mathbf{y}^{(**)} + \frac{\Delta t}{2} \bar{\mathbf{b}}^{(n)} \end{aligned} \quad (5.98)$$

geschrieben werden. Als Propagationsmatrix  $\mathbf{G}(\Delta t)$  kann ein beliebiger Algorithmus zur Lösung der homogenen Gleichung von zweiter Ordnung Genauigkeit in der Zeit benutzt werden, in denen die Unbekannten zu gleichen Zeitpunkten allokiert sind.

Die Aussage zur zeitlichen Ordnung gilt nur für zweimal stetig differenzierbare Anregungen. Dies ist für die mit einem PIC-Algorithmus berechneten Ströme nicht immer der Fall. Klassen von Algorithmen zur Stromberechnung, die diese Bedingungen erfüllen, werden im folgendem dargestellt.

## 6. STROMINTERPOLATIONSALGORITHMEN FÜR DIE DISKRETEN KONTINUITÄTSGLEICHUNGEN

Für die numerische Lösung der Maxwellschen Gleichung wird nur der zeitabhängige, hyperbolische Anteil verwendet. Somit wird das von einem Teilchenpaket erzeugte Feld nur durch seinen elektrischen Strom und nicht durch seine elektrische Ladungsdichte bestimmt. Im analytischen ist dieses Vorgehen gerechtfertigt, da die aus der Vlasov-Gleichung berechneten Ladungs- und Stromdichten die Kontinuitätsgleichung erfüllen. Für das elektrische Feld bedeutet dies, dass das Gauss-Gesetz immer erfüllt ist.

Im diskreten muss dies jedoch nicht der Fall sein und der Fehler im diskreten Gauss-Gesetz kann, solange ein elektrischer Strom fließt, mit der Zeit ungebunden ansteigen\*. Dabei lassen sich zwei Ursachen für den Anstieg unterscheiden. Erstens: Es existiert keine diskrete Kontinuitätsgleichung für die numerische Methode. Zweitens: Eine diskrete Kontinuitätsgleichung existiert, jedoch erfüllen die verwendeten Strom- und Ladungsinterpolationen sie nicht.

Die Problematik soll kurz anhand eines Beispiels erläutert werden. Dafür wird für eine numerische Simulation einmal die Ladungsdichte  $\mathbf{q}$  aus dem diskreten Gauss-Gesetz (3.6) berechnet und andererseits direkt aus der Position der Makroteilchen  $\mathbf{q}_p$ , letztere entspricht der physikalisch exakten Ladungsdichte. Im kontinuierlichen Fall, d.h. für die exakte Lösung der Maxwellschen Gleichungen und die Anwendung des analytischen Divergenzoperators, sind die beiden gewonnenen Ladungsdichten identisch. Im diskreten ist, wie bereits bemerkt, dies i.a. nicht der Fall. Abbildung 6.1 zeigt die relative Differenz der Ladungsdichten  $\delta\mathbf{q} := \mathbf{q}_p - \mathbf{q}$  für das LT-VLF Verfahren mit einer für das VLF Verfahren konservativen Strominterpolation. Der Fehler steigt offenbar mit der Zeit an und kann unter Umständen den Gesamtfehler der Rechnung dominieren.

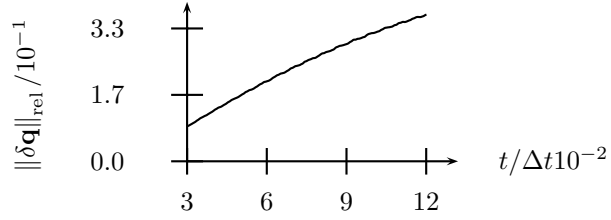
Dies motiviert die Untersuchung, wie die Ladungs- und Strominterpolation zu wählen sind, falls eine diskrete Kontinuitätsgleichung existiert.

Abschließend sei darauf hingewiesen, dass eine approximative Berücksichtigung des

---

\* Falls kein Strom fließt, ist aufgrund der strikten Stabilität des Verfahrens ein Anstieg des Fehlers im Gauss-Gesetz mit der Zeit ausgeschlossen.

**Abb. 6.1:** Zeitlicher Anstieg des Fehlers im semidiskreten FIT-Gauss-Gesetz für die LT-VLF Methode für eine nicht konservative Strominterpolation.



Gauss-Gesetzes anhand von  $\delta \mathbf{q}$  durch die Berechnung eines Korrekturpotential mit den in [36, 37, 38, 39] beschriebenen Methoden immer möglich ist. Der Speicheraufwand dieser Verfahren ist jedoch immer höher als der für Methoden, die auf einer konservativen Strom- und Ladungsinterpolation basieren.

## 6.1 Methode der Finiten Integration

### 6.1.1 Lösung der volldiskreten Kontinuitätsgleichung des Leap-Frog-Verfahrens

Den LF, S-LF und VLF Verfahren ist gemein, dass sie die diskrete Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\mathbf{q}^{(n+1)} - \mathbf{q}^{(n)}}{\Delta t} + \widetilde{\mathbf{S}} \widehat{\mathbf{j}}^{n+1/2} = 0. \quad (6.1)$$

haben. Um eine Lösung von (6.1) zu finden, wird die Gleichung als

$$\int_{t^{(n)}}^{t^{(n+1)}} \int_{\tilde{V}_m} \left( \partial_t \varrho + \operatorname{div} \vec{J} \right) dV dt = 0 \quad (6.2)$$

mit

$$\mathbf{q}^{(n)} := \int_{\tilde{V}_m} \varrho(\vec{x}, t^{(n)}) dV, \quad (6.3)$$

$$\widehat{\mathbf{j}}_{\alpha, m}^{n+1/2} := \frac{1}{\Delta t} \int_{t^{(n)}}^{t^{(n+1)}} \int_{\tilde{A}_{\alpha, m}} \vec{J}(\vec{x}, t) \cdot d\vec{A} dt, \quad \alpha \in [u, v, w]$$

für eine duale Gitterzelle mit Index  $m$  geschrieben. Folglich kann wegen (6.2) mit Hilfe der Projektion (6.3) jeder Lösung der kontinuierlichen Kontinuitätsgleichung eine Lösung der diskreten Kontinuitätsgleichung (6.1) zugewiesen werden.

Für ein Teilchen mit Ladung  $q_p$  und der Formfunktion  $S(\vec{x})$  ist die Ladungsdichte  $\varrho$  durch

$$\varrho(\vec{x}, t) := q_p S(\vec{x} - \vec{x}_p(t)) \quad (6.4)$$

und die mit ihr assoziierte Stromdichte durch

$$\vec{J}(\vec{x}, t) := \dot{\vec{x}}_p(t) \varrho(\vec{x}, t) \quad (6.5)$$

gegeben, sie erfüllt die kontinuierliche Kontinuitätsgleichung. Durch die Projektion (6.3) erhält man somit

$$\mathbf{q}^{(n)} := q_p \int_{\tilde{V}_m} S(\vec{x} - \vec{x}_p(t)) dV \quad (6.6)$$

und

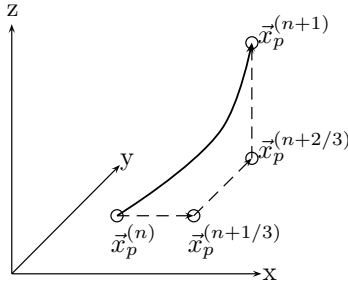
$$\hat{\mathbb{J}}_{\alpha, m}^{(n+1/2)} := \frac{1}{\Delta t} \int_{t^{(n)}}^{t^{(n+1)}} \int_{\tilde{A}_{\alpha, m}} \dot{\vec{x}}_p \varrho(\vec{x}, t) \cdot d\vec{A} dt, \quad \alpha \in [u, v, w] \quad (6.7)$$

als Lösung der diskreten Kontinuitätsgleichung (6.1).

Für beliebige Teilchentrajektorien und Formfunktionen ist eine geschlossene Auswertung der Integrale (6.6), (6.7) nicht möglich. Falls jedoch die Trajektorien unter Beibehaltung des Anfangs- und Endpunktes, und die Formfunktionen geeignet gewählt werden, ist eine exakte Berechnung der Integrale mit dem im folgendem vorgestellten Methoden möglich.

### Zerlegung der Trajektorie in achsenparallele Segmente

In diesem Abschnitt wird als Näherung angenommen, dass sich die Trajektorie des Teilchens aus drei Segmenten entlang der Koordinatenachsen zusammensetzt. Anstatt das Integral (6.7) für den Strom direkt auszuwerten, ist es einfacher, bei



**Abb. 6.2:** Die exakte Teilchentrajektorie und die durch drei koordinatenparallelen Segmente approximierte Trajektorie. Während die exakte Trajektorie stetig differenzierbar ist, ist dies für die Approximierte Trajektorie nicht der Fall.

einer gegebenen Gitterladung  $\mathbf{q}$  für jedes der drei achsenparallelen Segmente des Pfades (siehe Abb. 6.2) den Strom durch die aus (6.1) gewonnenen Rekursionsbeziehungen

$$\begin{aligned} \hat{\mathbb{J}}_{x,ijk} &= \hat{\mathbb{J}}_{x,i-1jk} - \delta Q_{x,ijk}, \\ \hat{\mathbb{J}}_{y,ijk} &= \hat{\mathbb{J}}_{y,ij-1k} - \delta Q_{y,ijk}, \\ \hat{\mathbb{J}}_{z,ijk} &= \hat{\mathbb{J}}_{z,ijk-1} - \delta Q_{z,ijk} \end{aligned} \quad (6.8)$$

mit

$$\begin{aligned}\delta Q_{x,ijk} &:= q_{ijk}^{(n+1/3)} - q_{ijk}^{(n)}, \\ \delta Q_{y,ijk} &:= q_{ijk}^{(n+2/3)} - q_{ijk}^{(n+1/3)}, \\ \delta Q_{z,ijk} &:= q_{ijk}^{(n+1)} - q_{ijk}^{(n+2/3)}\end{aligned}\tag{6.9}$$

zu berechnen. Da außerhalb der Träger von  $\delta Q_x, \delta Q_y, \delta Q_z$  der Strom gleich Null ist, können die Rekursionsbeziehungen auf einer entsprechenden  $x$ -,  $y$ - oder  $z$ -Fläche unmittelbar außerhalb des jeweiligen Trägers mit diesem Wert initialisiert werden.

Der Vorteil dieses Verfahrens ist, dass es einfach und somit ökonomisch zu implementieren ist. Als Nachteil dieses Verfahrens ist zum einem, die relativ grobe, nicht stetig differenzierbare Approximation des eigentlichen Pfades des Teilchens aufzuführen und zum anderem die systematische Bevorzugung der Raumrichtungen.

Eine Erweiterung der Methode, die diese Nachteile, bis auf die nicht stetige Differenzierbarkeit behebt, ist möglich, jedoch erhöht sich dann deutlich der Rechenaufwand. Durch eine Erhöhung der Anzahl der koordinatenparallelen Segmente und der Kollokation mit weiteren Punkten, zusätzlich zu den Anfangs- und Endpunkten, der exakten Trajektorie ist eine beliebig genaue Approximation der Trajektorie möglich. Die Bevorzugung von Koordinatenrichtungen kann durch eine Mittelung über alle Permutationen der Pfade im Raum eliminiert oder durch eine Permutation der Koordinatenrichtungen für die Segmente des Pfades in jedem Zeitschritt verringert werden. Für eine weiterführende Diskussion dieser Art von Methoden sei auf [40] verwiesen.

### Eine auf B-Splines basierende Methode

Um ein auf einer stetig differenzierbaren Trajektorie basierendes Verfahren zu erhalten, wird eine unter die Kategorie der in [41] eingeführten Virtual-Particle-Methode fallendes Verfahren hergeleitet. Dabei wird im folgenden nur der Fall eines homogenen Gitters behandelt, der inhomogene Fall kann durch eine Koordinatentransformation auf den homogenen Fall zurückgeführt werden. Für die Formfunktionen der Teilchen wird angenommen, dass sie als Tensorprodukt von uniformen B-Splines vom Grad  $k$  durch

$$S(\vec{x}) := B_k\left(\frac{x}{\Delta}\right) B_k\left(\frac{y}{\Delta}\right) B_k\left(\frac{z}{\Delta}\right)\tag{6.10}$$

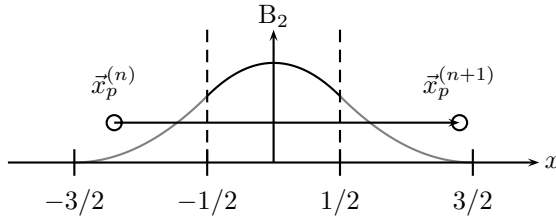
gegeben sind. Eine Definition der uniformen B-Splines wird im Anhang D gegeben. Aufgrund der Definition der B-Splines ist eine einfache Auswertung der räumlichen Integration möglich. Die Integrale (6.6) und (6.7) vereinfachen sich zu

$$q_{ijk}(t) = q_p B_{k+1}\left(\frac{x_i - x_p(t)}{\Delta}\right) B_{k+1}\left(\frac{y_j - y_p(t)}{\Delta}\right) B_{k+1}\left(\frac{z_k - z_p(t)}{\Delta}\right)\tag{6.11}$$

und

$$\begin{aligned}
 \hat{j}_{x,ijk}^{(n+1/2)} &= \frac{q_p}{\Delta t} \int_{t^{(n)}}^{t^{(n+1)}} \dot{x}_p(t) B_k\left(\frac{\tilde{x}_i - x_p(t)}{\Delta}\right) B_{k+1}\left(\frac{y_j - y_p(t)}{\Delta}\right) B_{k+1}\left(\frac{z_k - z_p(t)}{\Delta}\right) dt, \\
 \hat{j}_{y,ijk}^{(n+1/2)} &= \frac{q_p}{\Delta t} \int_{t^{(n)}}^{t^{(n+1)}} \dot{x}_p(t) B_{k+1}\left(\frac{x_i - x_p(t)}{\Delta}\right) B_k\left(\frac{\tilde{y}_j - y_p(t)}{\Delta}\right) B_{k+1}\left(\frac{z_k - z_p(t)}{\Delta}\right) dt, \\
 \hat{j}_{z,ijk}^{(n+1/2)} &= \frac{q_p}{\Delta t} \int_{t^{(n)}}^{t^{(n+1)}} \dot{x}_p(t) B_{k+1}\left(\frac{x_i - x_p(t)}{\Delta}\right) B_{k+1}\left(\frac{y_j - y_p(t)}{\Delta}\right) B_k\left(\frac{\tilde{z}_k - z_p(t)}{\Delta}\right) dt.
 \end{aligned} \tag{6.12}$$

Mithin verbleibt nur noch die Aufgabe, die Integrale (6.12) auszuwerten. Für



**Abb. 6.3:** Trajektorie eines Teilchens und die drei von ihm während eines Zeitschrittes passierten polynomialen Bereiche eines B-Splines vom Grad zwei. Die Definitionsbereiche, auf denen der B-Spline polynomial ist, sind als graue und schwarze Segmente des Splines gezeichnet.

eine lineare Trajektorie sind die Integranden ein Produkt von B-Spline Funktionen und somit stückweise polynomial (siehe Abb. 6.3). Dies ermöglicht eine exakte Auswertung der Integrale (6.12).

In einem ersten Schritt sind die Volumen zu bestimmen, in denen die B-Splines polynomial sind. Mit Hilfe der Definition der B-Splines kann dabei die folgende Aussage gemacht werden: ist die Formfunktion ein Tensorprodukt vom B-Splines des Grades  $k$ , so sind die Integranden (6.12) polynomial auf dem primären Gitter, falls  $k$  gerade ist und polynomial auf dem dualen Gitter, falls  $k$  ungerade ist. Die lineare Teilchentrajektorie wird dann in Segmente aufgeteilt, die vollständig in einem primären(dualen) Gittervolumen verlaufen. Das Auffinden der Segmente kann auf das Problem des Schnittes zwischen der linearen Trajektorie und Ebenen reduziert werden, siehe z.B. [42] für einen entsprechenden Algorithmus. Da innerhalb eines jeden Segmentes die Integranden polynomial sind, kann man die Integrale entweder analytisch berechnen oder aber durch eine Gauss-Legendre Quadraturformel [43] der Ordnung  $n = \lceil 3(r+1)/2 \rceil$  ebenfalls exakt berechnen. Die Gauss-Legendre Quadratur hat den Vorteil einer einfacheren und flexibleren Implementierung als eine explizite Berechnung der Stammfunktionen der Integranden. Als einziger Nachteil dieser Verfahrensklasse ist ihr hoher numerischer Aufwand anzuführen. Im Fall von B-Splines vom Grad 0 ist eine Implementierung in [44] und eine ökonomisierte, konservative Approximation in [45] zu finden.

### 6.1.2 Lösung der volldiskreten Kontinuitätsgleichung des Split-Operator-Verfahrens in longitudinaler und transversaler Raumrichtung

Um eine die diskreten Kontinuitätsgleichung (5.62) des LT-VLF Verfahrens erfüllende Ladungs- und Strominterpolation herzuleiten, wird (5.62) als

$$\frac{\mathbf{q}_{\text{LT}}^{(n+1)} - \mathbf{q}_{\text{LT}}^{(n)}}{\Delta t} + \tilde{\mathbf{S}}_x \mathbf{\Lambda} \hat{\mathbf{j}}_{x,\text{LT}}^{(n+1/2)} + \tilde{\mathbf{S}}_y \mathbf{\Lambda} \hat{\mathbf{j}}_{y,\text{LT}}^{(n+1/2)} + \tilde{\mathbf{S}}_z \hat{\mathbf{j}}_{z,\text{LT}}^{(n+1/2)} = 0 \quad (6.13)$$

mit dem linearen Operator

$$\mathbf{\Lambda} := \mathbf{1} - \frac{\sigma^2}{4} \mathbf{P}_z \mathbf{P}_z^T \quad (6.14)$$

geschrieben. Die Indizierung mit LT dient im folgendem dazu, die speziell für das LT-VLF Verfahren definierte Ladungs- und Strominterpolation zu kennzeichnen. Um die Gleichung (6.13) zu lösen, wird zunächst die diskrete Kontinuitätsgleichung (6.1)

$$\frac{\mathbf{q}_{\text{LF}}^{(n+1)} - \mathbf{q}_{\text{LF}}^{(n)}}{\Delta t} + \tilde{\mathbf{S}}_x \hat{\mathbf{j}}_{x,\text{LF}}^{(n+1/2)} + \tilde{\mathbf{S}}_y \hat{\mathbf{j}}_{y,\text{LF}}^{(n+1/2)} + \tilde{\mathbf{S}}_z \hat{\mathbf{j}}_{z,\text{LF}}^{(n+1/2)} = 0 \quad (6.15)$$

mit einer sie lösenden Ladungsinterpolation  $\mathbf{q}_{\text{LF}}$  und Strominterpolation  $\hat{\mathbf{j}}_{\text{LF}}$  betrachtet. Die Anwendung des Operators  $\mathbf{\Lambda}$  auf (6.15) und das Ausnutzen der Identitäten  $[\tilde{\mathbf{S}}_x, \mathbf{\Lambda}] = 0$  und  $[\tilde{\mathbf{S}}_y, \mathbf{\Lambda}] = 0$  ergibt:

$$\frac{\mathbf{\Lambda} \mathbf{q}_{\text{LF}}^{(n+1)} - \mathbf{\Lambda} \mathbf{q}_{\text{LF}}^{(n)}}{\Delta t} + \tilde{\mathbf{S}}_x \mathbf{\Lambda} \hat{\mathbf{j}}_{x,\text{LF}}^{(n+1/2)} + \tilde{\mathbf{S}}_y \mathbf{\Lambda} \hat{\mathbf{j}}_{y,\text{LF}}^{(n+1/2)} + \tilde{\mathbf{S}}_z \mathbf{\Lambda} \hat{\mathbf{j}}_{z,\text{LF}}^{(n+1/2)} = 0 \quad (6.16)$$

Ein Koeffizientenvergleich von (6.13) mit (6.16) liefert die Beziehung

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_{\text{LT}}^{(n)} &= \mathbf{\Lambda} \mathbf{q}_{\text{LF}}^{(n)}, \\ \hat{\mathbf{j}}_{x,\text{LT}}^{(n+1/2)} &= \hat{\mathbf{j}}_{x,\text{LF}}^{(n+1/2)}, \\ \hat{\mathbf{j}}_{y,\text{LT}}^{(n+1/2)} &= \hat{\mathbf{j}}_{y,\text{LF}}^{(n+1/2)}, \\ \hat{\mathbf{j}}_{z,\text{LT}}^{(n+1/2)} &= \mathbf{\Lambda} \hat{\mathbf{j}}_{z,\text{LF}}^{(n+1/2)} \end{aligned} \quad (6.17)$$

zwischen den Lösungen der diskreten Kontinuitätsgleichungen (6.15) und (6.13). Dies bedeutet, dass für jede konservative Strominterpolation mit einem der in Abschnitt 6.1.1 vorgestellten Verfahren mit Hilfe des Operators  $\mathbf{\Lambda}$  eine konservative Strominterpolation für das LT-VLF Verfahren gewonnen werden kann. Der Operator  $\mathbf{\Lambda}$  hat dabei die folgenden, innerhalb des Stabilitätsbereiches des LT-VLF Verfahrens gültigen, Eigenschaften:

1. Störung des Einheitsoperators von zweiter Ordnung im Raum:

$$\|\mathbf{1} - \mathbf{\Lambda}\|_h = \mathcal{O}(\Delta^2)$$

2. Erhaltung des Vorzeichens:  
Positive/negative Gitterfunktionen werden auf positive/negative Gitterfunktionen abgebildet.
3. Erhaltung der Ladung:  
Die summierten Gitterladungen von  $\mathbf{q}$  und  $\mathbf{\Lambda q}$  sind identisch.
4. Räumlicher Tiefpassfilter für  $\hat{\mathbf{j}}_{z,\text{LF}}^{(n+1/2)}$  und  $\mathbf{q}_{\text{LF}}^{(n)}$  in z-Richtung:  
Seine Übertragungsfunktion\* ist  $G(\beta_z) = 1 - \sigma^2 \sin^2(\beta_z/2)$ .

Aufgrund dieser Eigenschaften ist gewährleistet, dass die mittels des Operators  $\mathbf{\Lambda}$  gewonnenen Ladungen und Ströme physikalisch sinnvoll sind und als durch einen Tiefpass gefilterten Größen interpretiert werden können. An der Stabilitätsgrenze des LT-VLF Verfahrens, d.h. für  $\sigma = 1$  werden insbesondere die Grenzmoden  $\beta_z = \pm\pi$  aus der Anregung eliminiert.

### 6.1.3 Lösung der volldiskreten Kontinuitätsgleichung des Split-Operator-Verfahrens in drei Raumrichtungen

Um eine die diskreten Kontinuitätsgleichung (5.60) des XYZ-VLF Verfahrens erfüllende Ladungs- und Strominterpolation herzuleiten, wird (5.60) als

$$\frac{\mathbf{q}_{\text{XYZ}}^{(n+1)} - \mathbf{q}_{\text{XYZ}}^{(n)}}{\Delta t} + \tilde{\mathbf{S}}_y \mathbf{\Lambda}_y \mathbf{\Lambda}_z \hat{\mathbf{j}}_{x,\text{XYZ}}^{(n+1/2)} + \tilde{\mathbf{S}}_y \mathbf{\Lambda}_z \hat{\mathbf{j}}_{y,\text{XYZ}}^{(n+1/2)} + \tilde{\mathbf{S}}_z \hat{\mathbf{j}}_{z,\text{XYZ}}^{(n+1/2)} = 0 \quad (6.18)$$

mit dem linearen Operatoren

$$\mathbf{\Lambda}_y := \mathbf{1} - \frac{\sigma^2}{8} \mathbf{P}_y \mathbf{P}_y^T \quad (6.19)$$

und

$$\mathbf{\Lambda}_z := \mathbf{1} - \frac{\sigma^2}{8} \mathbf{P}_z \mathbf{P}_z^T \quad (6.20)$$

geschrieben. In Analogie zum Vorgehen für die LT-VLF Methode kann aus der Lösung der diskreten Kontinuitätsgleichung (6.13) durch Anwendung des Operators  $\mathbf{\Lambda}_y \mathbf{\Lambda}_z$  auf (6.13) und einem Koeffizientenvergleich mit (6.18) die folgende Beziehung zwischen den Lösungen gefunden werden

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_{\text{XYZ}}^{(n)} &= \mathbf{\Lambda}_y \mathbf{\Lambda}_z \mathbf{q}_{\text{LF}}^{(n)}, \\ \hat{\mathbf{j}}_{x,\text{XYZ}}^{(n+1/2)} &= \hat{\mathbf{j}}_{x,\text{LF}}^{(n+1/2)}, \\ \hat{\mathbf{j}}_{y,\text{XYZ}}^{(n+1/2)} &= \mathbf{\Lambda}_y \hat{\mathbf{j}}_{y,\text{LF}}^{(n+1/2)}, \\ \hat{\mathbf{j}}_{z,\text{XYZ}}^{(n+1/2)} &= \mathbf{\Lambda}_y \mathbf{\Lambda}_z \hat{\mathbf{j}}_{z,\text{LF}}^{(n+1/2)}. \end{aligned} \quad (6.21)$$

Innerhalb des Stabilitätsbereiches des Verfahrens gelten für den Operator  $\mathbf{\Lambda}_y \mathbf{\Lambda}_z$  die folgenden Aussagen:

---

\* Für die Notation sei auf Kapitel 5.4 verwiesen.



1. Störung des Einheitsoperators von zweiter Ordnung im Raum:  
 $\|\mathbf{1} - \mathbf{\Lambda}_z \mathbf{\Lambda}_y\|_h = \mathcal{O}(\Delta^2)$
2. Erhaltung des Vorzeichens:  
Positive/negative Gitterfunktionen werden auf positive/negative Gitterfunktionen abgebildet.
3. Erhaltung der Ladung:  
Die summierten Gitterladungen von  $\mathbf{q}$  und  $\mathbf{\Lambda}_z \mathbf{\Lambda}_y \mathbf{q}$  sind identisch.

Aufgrund dieser Eigenschaften ist gewährleistet, dass die mittels des Operators  $\mathbf{\Lambda}_z \mathbf{\Lambda}_y$  gewonnenen Ladungen und Ströme physikalisch sinnvoll sind. Der Operator  $\mathbf{\Lambda}_z \mathbf{\Lambda}_y$  kann an der Stabilitätsgrenze des XYZ-VLF Verfahrens  $\sigma = 2$  nicht als Tiefpassfilter interpretiert werden.

## 6.2 Finite Volumen Methoden

Der Strom für die FVM wird durch die approximative Berechnung des Integrals

$$\mathbf{j}_m^{(n+1/2)} \approx \frac{1}{\Delta t V_m} \int_{t^{(n)}}^{t^{(n+1)}} \int_{y_m} \vec{v}_p \varrho(\vec{x} - \vec{x}_p) dV dt \quad (6.22)$$

gewonnen. Dies geschieht für die vorliegenden Verfahren durch eine Quadraturformel von zweiter Ordnung Genauigkeit in der Zeit und im Raum

$$\mathbf{j}_{m,\alpha}^{(n+1/2)} := v_{p,\alpha}^{(n+1/2)} \varrho(\vec{x}_m - \vec{x}_p^{(n+1/2)}), \quad \alpha \in [x, y, z]. \quad (6.23)$$

Der so berechnete Strom erfüllt nicht die volldiskrete Kontinuitätsgleichung der VLF-ZFV Methode.

## 7. FILTERN DER STRÖME UND DER FELDER

Für die Einführung von Tiefpassfiltern zur Unterdrückung von kurzen Wellenlängen im Raum und hohen Frequenzen in der Zeit für die elektromagnetische Feldlösung gibt es für PIC Simulationen zwei Gründe. Erstens, der das Raumladungsfeld erzeugende Strom wird durch eine, im Vergleich zum kontinuierlichem Problem, kleine Anzahl von Makroteilchen berechnet. Dies führt zu einer starken Überhöhung der Teilchenfluktuationen und somit zu einer, im Vergleich zur kontinuierlichen Lösung, stark überhöhten Amplituden für kurze Wellenlängen und hohen Frequenzen. Zweitens, für viele zur numerischen Lösung der Maxwellschen Gleichungen verwendeten Verfahren weicht für kurze Wellenlängen die NNPG stark von der NPPG ab. Dies hat zur Folge, dass die Moden mit einer kleinen Wellenlänge nach relativ kurzer Zeit mit einer vollkommen falschen Phase in die numerische Lösung eingehen und dadurch starke Oszillationen in ihr erzeugen.

Zuerst wird das Filtern des Stromes betrachtet, also nur das der Anregung. Der gleiche Effekt kann zwar auch durch den Einsatz von Formfunktionen höherer Ordnung für die Teilchen erreicht werden, jedoch nur mit signifikant höherem Rechenaufwand. Beide Methoden haben für nicht dissipative Verfahren den Nachteil, dass sie einen Anstieg der Amplitude für kurze Wellenlängen mit der Zeit nur reduzieren, jedoch nicht verhindern können. Anschließend wird, um letzteres zu erreichen, auch für nicht dissipative Verfahren zur Lösung der Maxwellschen Gleichungen ein Dissipationsmechanismus für die kurzen Wellenlängen nachträglich eingeführt. Dabei gibt es zunächst die zwei Möglichkeiten, räumliche oder zeitliche Filter zu verwenden. Eine strikte Trennung ist jedoch weder möglich noch zweckmäßig, da mit Hilfe der Lax-Wendroff-Technik [16] zeitliche Ableitungen aufgrund der dem Problem zugrunde liegenden partiellen Differentialgleichung durch räumliche Ableitungen ersetzt werden können. Die Umwandlung in räumliche Ableitungen macht die Interpretation eines Filters als einen dämpfenden physikalischen Prozess möglich und erlaubt eine speichereffizientere Implementierung als ein rein zeitlicher Filter. Ein weiterer Vorteil von räumlichen Filtern ist die Möglichkeit, räumlich anisotrop zu filtern, was angesichts der speziellen Dispersionseigenschaften der entwickelten Verfahren sinnvoll ist.

## 7.1 Räumliches Filtern des Stroms

Da für die spätere Anwendung in Linearbeschleunigern die dominante Bewegungsrichtung o.B.d.A die  $z$ -Richtung sei, wird ein nur in dieser Richtung wirkender räumlicher Filter betrachtet. Der in [46] vorgeschlagene Filteroperator ist durch

$$\begin{aligned} F : f &\rightarrow \widehat{f}, \\ \alpha \widehat{f}_{k+1} + \widehat{f}_k + \alpha \widehat{f}_{k-1} &= \frac{1}{2} \sum_{l=0}^2 a_l (f_{k+l} + f_{k-l}) \end{aligned} \quad (7.1)$$

mit den Koeffizienten

$$a_2 = -\frac{1}{8} + \frac{\alpha}{4}, \quad a_1 = \frac{1}{8} + \alpha, \quad a_0 = \frac{1}{8} + \alpha - a_2 \quad (7.2)$$

definiert. Der Filter hat die folgende Übertragungsfunktion

$$G(\beta_z) = \frac{\sum_{l=0}^2 a_l \cos(l\beta_z)}{1 + 2\alpha \cos(\beta_z)} \quad (7.3)$$

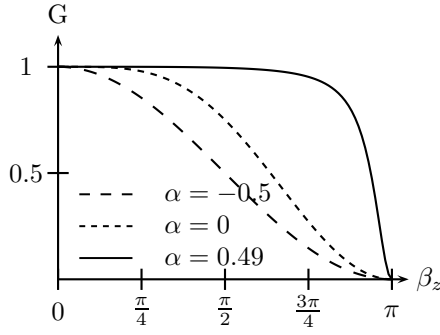
mit den Eigenschaften:

1. Eliminierung der höchsten Moden,  $G(\pm\pi) = 0$ .
2. Keine Phasenverschiebung, da  $F$  symmetrisch ist.
3. Von vierter Ordnung Genauigkeit im Raum für homogene Gitter.
4. Regulierung der Dämpfung durch den Parameter  $\alpha$ .

Die maximale Dämpfung wird für den Parameter  $\alpha = -1/2$  erzielt, für  $\alpha = 0$  ist der Filter explizit und für  $\alpha = 1/2$  ist er ein Allpassfilter. Für eine ausführliche Diskussion und eine Erweiterung zu höherer Ordnung sei auf [46] verwiesen. Der Filter ist formal implizit, jedoch skaliert der Aufwand zur Lösung des tridiagonalen Gleichungssystems nur linear mit der Zahl der Unbekannten, falls eine verkürzte Gaußelimination [47] verwendet wird. Die für eine der diskreten Kontinuitätsgleichungen hergeleiteten Lösungen für die Ladungen und Ströme sind auch nach dem Filtern wieder Lösungen der jeweiligen diskreten Kontinuitätsgleichung. Dies folgt unmittelbar aus der Eigenschaft  $[F, \widetilde{\mathbf{S}}_*] = 0$  und Anwendung des Filters  $F$  auf die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{F\mathbf{q}^{(n+1)} - F\mathbf{q}^{(n)}}{\Delta t} + \widetilde{\mathbf{S}}_* F\widehat{\mathbf{j}}^{(n+1/2)} = 0, \quad (7.4)$$

wobei  $\widetilde{\mathbf{S}}_*$  für einen der diskreten Divergenzoperatoren  $\widetilde{\mathbf{S}}, \widetilde{\mathbf{S}}_{XYZ}, \widetilde{\mathbf{S}}_{LT}$  steht.



**Abb. 7.1:** Die Übertragungsfunktion  $G$  des Filters  $F$  in Abhängigkeit vom Parameter  $\alpha$ . Für  $\alpha = -0.5$  ist die Dämpfung am stärksten und für  $\alpha = 0.5$  ist der Filter ein Allpass.

## 7.2 Filtern des Verlet-Leap-Frog-Verfahrens

Um eine kontrollierbare Dissipation in die VLF-Methode einzufügen, wird analog zu dem in [41] TCA-Algorithmus, für die Berechnung des elektrischen Feldes ein zeitlich gemittelttes magnetisches Feld verwendet. Der resultierende Algorithmus wird im folgenden als TCA-VLF Methode bezeichnet und lautet

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{h}}^{(n+1/2)} &= \hat{\mathbf{h}}^{(n)} - \frac{\Delta t}{2} \mathbf{M}_{\mu}^{-1} \mathbf{C} \hat{\mathbf{e}}^{(n)}, \\ \hat{\mathbf{e}}^{(n+1)} &= \hat{\mathbf{e}}^{(n)} + \Delta t \mathbf{M}_{\epsilon}^{-1} \tilde{\mathbf{C}} \left( \hat{\mathbf{h}}^{(n+1/2)} + 2\alpha \left( \hat{\mathbf{h}}^{(n+1/2)} - \hat{\mathbf{h}}^{(n)} \right) \right), \\ \hat{\mathbf{h}}^{(n+1)} &= \hat{\mathbf{h}}^{(n+1/2)} - \frac{\Delta t}{2} \mathbf{M}_{\mu}^{-1} \mathbf{C} \hat{\mathbf{e}}^{(n+1)}.\end{aligned}\quad (7.5)$$

Der Parameter  $\alpha$  in (7.5) kontrolliert die Dissipation des Verfahrens. Für  $\alpha = 0$  stimmt die TCA-VLF Methode mit der VLF Methode überein. Eine äquivalente, rein räumliche Formulierung der zeitlichen Mittelung in (7.5) ist durch ein Substitution der diskreten zeitlichen Ableitung mittels der ersten Gleichung aus (7.5) möglich und ergibt

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{h}}^{(n+1/2)} &= \hat{\mathbf{h}}^{(n)} - \frac{\Delta t}{2} \mathbf{M}_{\mu}^{-1} \mathbf{C} \hat{\mathbf{e}}^{(n)}, \\ \hat{\mathbf{e}}^{(n+1)} &= \hat{\mathbf{e}}^{(n)} + \Delta t \mathbf{M}_{\epsilon}^{-1} \tilde{\mathbf{C}} \left( \hat{\mathbf{h}}^{(n+1/2)} - \alpha \Delta t \mathbf{M}_{\epsilon}^{-1} \mathbf{C} \hat{\mathbf{e}}^{(n)} \right), \\ \hat{\mathbf{h}}^{(n+1)} &= \hat{\mathbf{h}}^{(n+1/2)} - \frac{\Delta t}{2} \mathbf{M}_{\mu}^{-1} \mathbf{C} \hat{\mathbf{e}}^{(n+1)}.\end{aligned}\quad (7.6)$$

Beide Formulierungen sind nützlich, die Formulierung (7.5) hat zwar einen höheren Speicheraufwand, aber dafür weniger arithmetische Operationen als die Formulierung (7.6). Durch eine Fourieranalyse kann das Folgende bewiesen werden: Das TCA-VLF Verfahren ist stabil, falls die Parameter  $\sigma$  und  $\alpha$  zu

$$\sigma \leq \frac{1}{\sqrt{3}}, \quad 0 \leq \alpha \leq \frac{1}{6\sigma^2} - \frac{1}{2} \quad (7.7)$$

gewählt werden. Für propagierende Moden entspricht dies der Bedingung

$$K_{LF3} (1 + \alpha)^2 \sigma^2 \leq 4$$

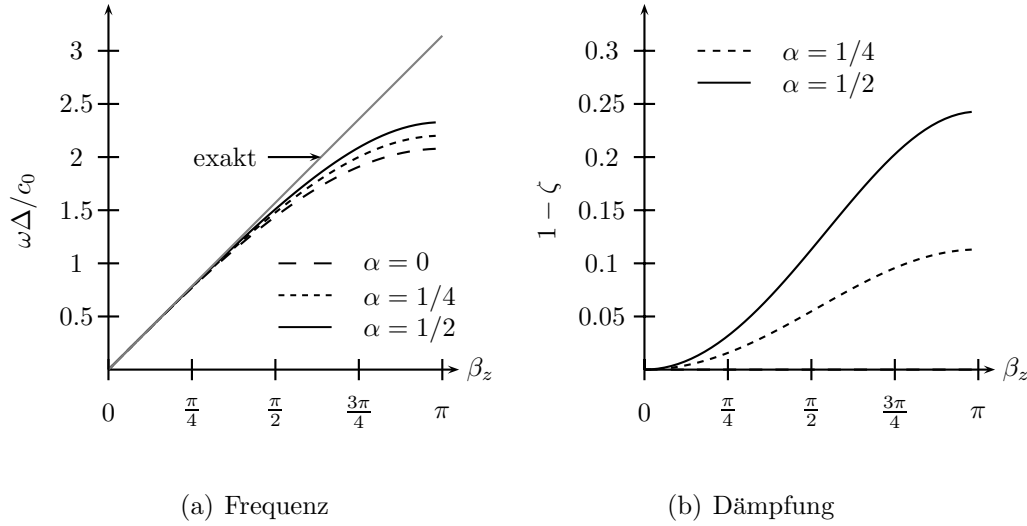
und es ergibt sich der Amplifizierungsfaktor  $\zeta$  zu

$$\zeta = 1 - 4\alpha\sigma^2 K_{LF3}. \quad (7.8)$$

Für die Dispersionsbeziehung erhält man

$$\tan(\omega\Delta t)^2 = 4 \frac{K_{LF3} (1 - K_{LF3} (\alpha + 1)^2 \sigma^2)}{(1 - 2K_{LF3} (\alpha + 1) \sigma^2)^2} \sigma^2. \quad (7.9)$$

Im Vergleich zur VLF Methode hat die TCA-VLF Methode zu einem gegebenen Courantparameter ein besseres Dispersionsverhalten. Dies wird in Abb. 7.2(a) für einen Wellenvektor in  $z$ -Richtung illustriert. Die Dämpfung der Moden wird in Abb. 7.2(b) gezeigt und ist, wie gewünscht, für kurze Wellenlängen am stärksten.



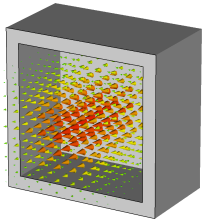
**Abb. 7.2:** Frequenz und Dämpfung für  $\vec{\beta} = (0, 0, \beta_z)$  für verschiedene Werte des Dämpfungsparameters  $\alpha$  und einem Courantparameter von  $\sigma = 0.8/\sqrt{3}$ . Für  $\alpha = 0$  tritt keine Dämpfung auf, da das Verfahren mit dem VLF Verfahren übereinstimmt.

## 8. VALIDIERUNG UND VERGLEICH DER METHODEN

Um eine korrekte Implementierung der numerischen Algorithmen zu gewährleisten und einen Vergleich der Algorithmen untereinander zu haben, werden diese soweit wie möglich anhand von analytischen Lösungen validiert. Für die numerische Lösung der Maxwell'schen Gleichungen geschieht dies für verschiedene homogene Gitter, um die theoretische Konvergenzordnung der numerischen Verfahren praktisch zu verifizieren. Im Gegensatz dazu, steht eine analytische Lösung der vollständigen Vlasov-Maxwell Gleichungen ohne vereinfachende Annahmen nicht zur Verfügung, deshalb wird eine numerische Lösung als Referenzlösung verwendet.

### 8.1 Eigenmoden eines Rechteckresonators

Die Geometrie besteht aus einem rechteckigem Resonator der Kantenlänge  $L$ , dessen Wände als perfekt elektrisch leitend angenommen sind. Sie wird mit einem homogenen Gitter der Schrittweite  $\Delta$  diskretisiert und für jedes numerische Verfahren wird jeweils sein maximal stabiler Zeitschritt benutzt. Als analytische Referenzlösung werden die Eigenmoden der Geometrie vom Typ  $\text{TM}_{mnp}$  verwendet, siehe Abb. 8.1. Als Anfangswert für die numerischen Verfahren werden die auf die jeweiligen Gitterräume projizierten  $\text{TM}_{mnp}$ -Eigenmoden genommen. Der Fehler wird wie folgt



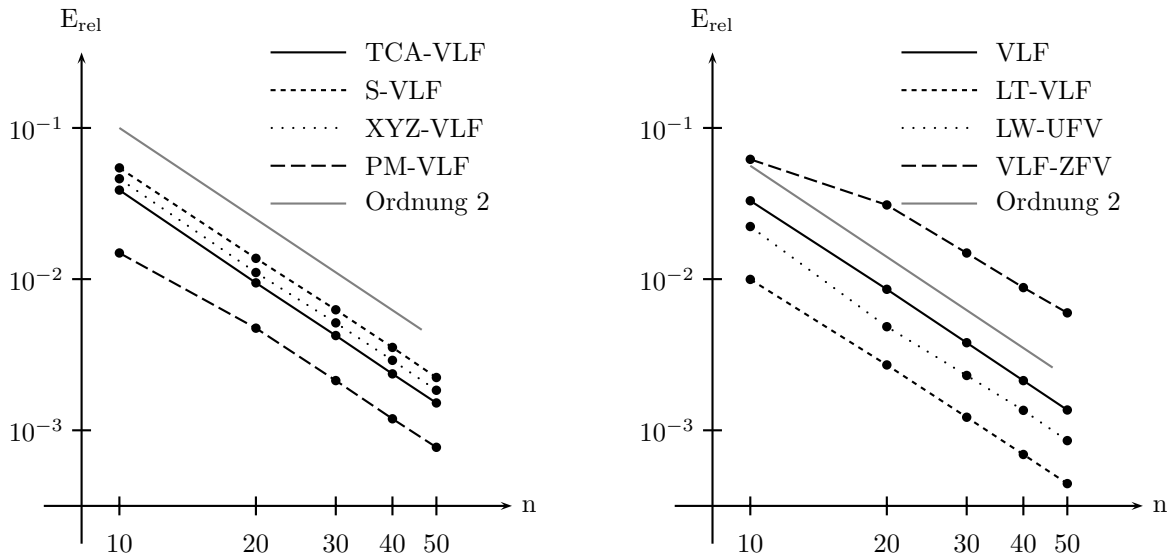
**Abb. 8.1:** Rechteckresonator und elektrisches Feld für einen  $\text{TM}_{115}$  Mode.

berechnet: Zuerst wird die analytische Lösung für alle auf der FIT beruhenden Verfahren durch Mittelung über die jeweiligen Kanten (siehe Gl. (3.1)) und für alle auf der FVM basierenden Verfahren durch Mittelung über die jeweiligen Volumen (siehe Gl. (3.22)) auf den entsprechenden Gitterraum projiziert. Anschließend wird die  $L_2$ -Norm der Differenz zwischen der projizierten analytischen und der numerisch erhaltenen Lösung für jeden Zeitschritt berechnet. Die innerhalb von fünf Perioden

auftretende maximale  $L_2$ -Norm der Differenz wird dann als Fehler genommen. Die Ergebnisse für alle vorgestellten Verfahren für den  $TM_{115}$ -Mode sind in Tab. 8.1 dargestellt. Da der  $TM_{115}$ -Mode die stärkste räumliche Variation in  $z$ -Richtung hat, haben die Split-Operator-Verfahren einen deutlich niedrigeren Fehler als die ungesplitteten Verfahren. Abbildung 8.2 zeigt die Fehler der Verfahren in doppelt logarithmischer Darstellung. Aus ihnen ist ersichtlich, dass jedes der Verfahren mit zweiter Ordnung Genauigkeit konvergiert.

N	VLF	TCA-VLF	S-LF	XYZ-VLF	LT-VLF	PM-VLF	XYZ-LW-UVF	VLF-ZVLF
$10^3$	3.30	3.88	5.44	4.62	0.99	1.49	2.23	6.20
$20^3$	0.86	0.94	1.37	1.10	0.27	0.47	0.48	3.09
$30^3$	0.38	0.32	0.63	0.51	0.12	0.21	0.23	1.49
$40^3$	0.21	0.24	0.35	0.29	0.07	0.12	0.14	0.87
$50^3$	0.13	0.15	0.22	0.18	0.04	0.07	0.08	0.59

**Tab. 8.1:** Fehler der Verfahren für den  $TM_{115}$  Mode.

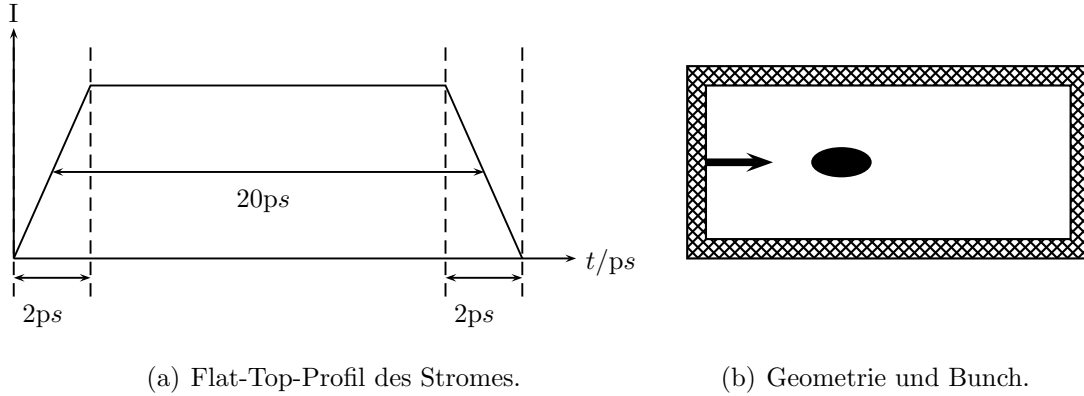


**Abb. 8.2:** Graphische Darstellung des relativen Fehlers  $E_{rel}$  aufgetragen gegen die Anzahl von Gitterpunkten  $n$  pro Raumrichtung. Die Steigung für Verfahren von zweiter Ordnung Genauigkeit ist grau eingezeichnet.

## 8.2 Drift eines Bunches von Elektronen

Zur Validierung des vollständigen PIC-Algorithmus wird der Drift eines Bunches von Elektronen in einer zylindrischen Kavität berechnet. Die Kavität hat einen Radius von 0.4cm, eine Länge von 30cm und ihre Wände sind als perfekt elektrisch leitend angenommen. Durch den Mittelpunkt der linken Stirnfläche der Kavität wird ein rotationssymmetrischer Bunch injiziert. Der Radius des Bunches beträgt 4mm und die Ladung ist homogen in radialer Richtung verteilt. Das zeitliche Profil

entspricht einer Flat-Top-Verteilung, siehe Abb. 8.3(a), mit einer Anstiegszeit von 2ps und FWHM Zeit von 20ps, bei einer Gesamtladung von 5nC des Bunches. Alle Teilchen des Bunches fliegen mit der gleichen Geschwindigkeit von  $\beta = 0.95$  parallel zur z-Achse. Die beschriebene Problemkonfiguration ist rotationsymmetrisch, dies erlaubt die Berechnung einer Referenzlösung mit Hilfe des von dem Programmpaketes MAFIA [48] zur Verfügung gestellten, zweidimensionalen PIC-Algorithmus TS2.

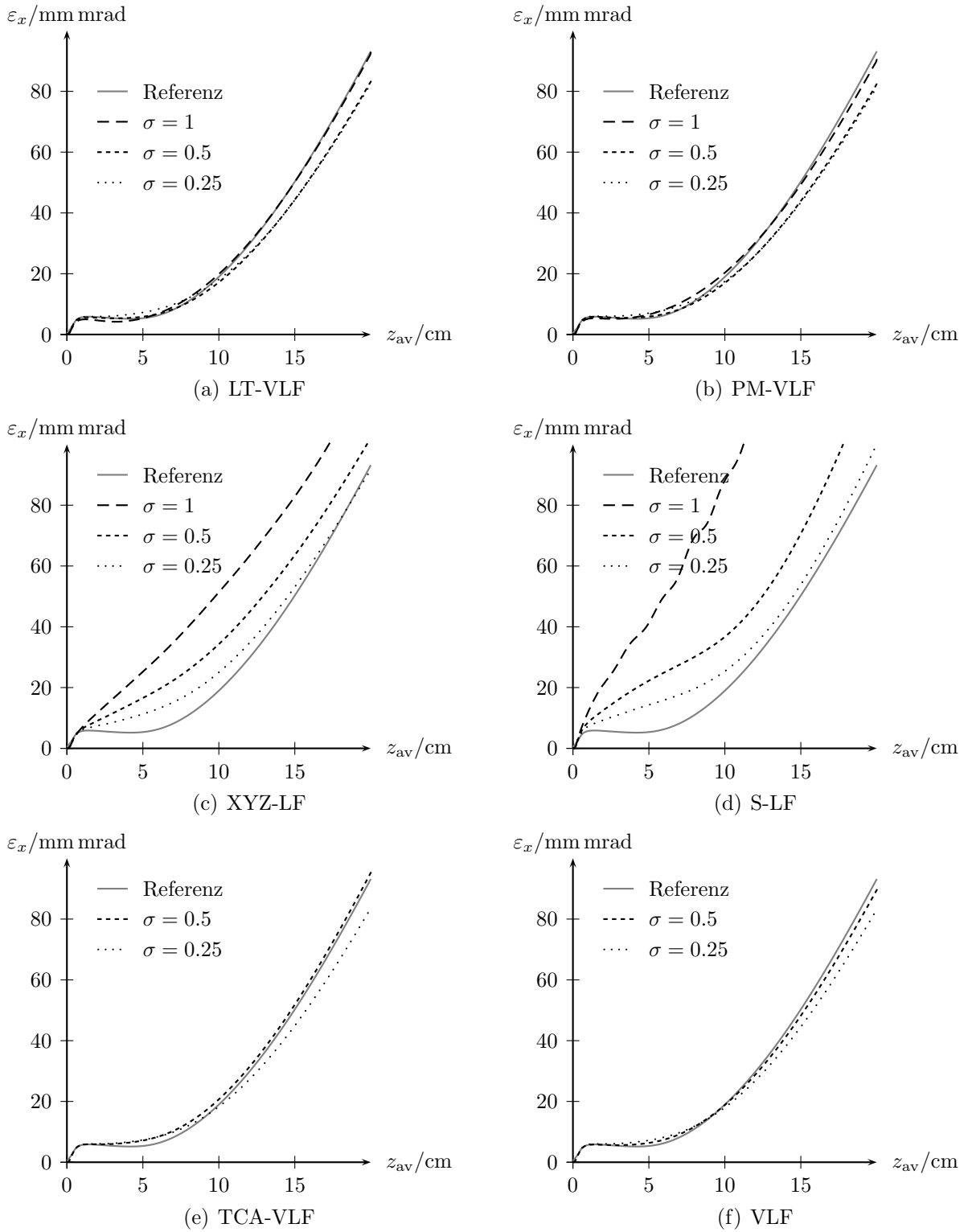


**Abb. 8.3:** Links das zeitliche Flat-Top-Profil des Stromes. Rechts die zylindrische Kavität, der mit dem Pfeil gekennzeichnete Ort der Injektion und der Bunch.

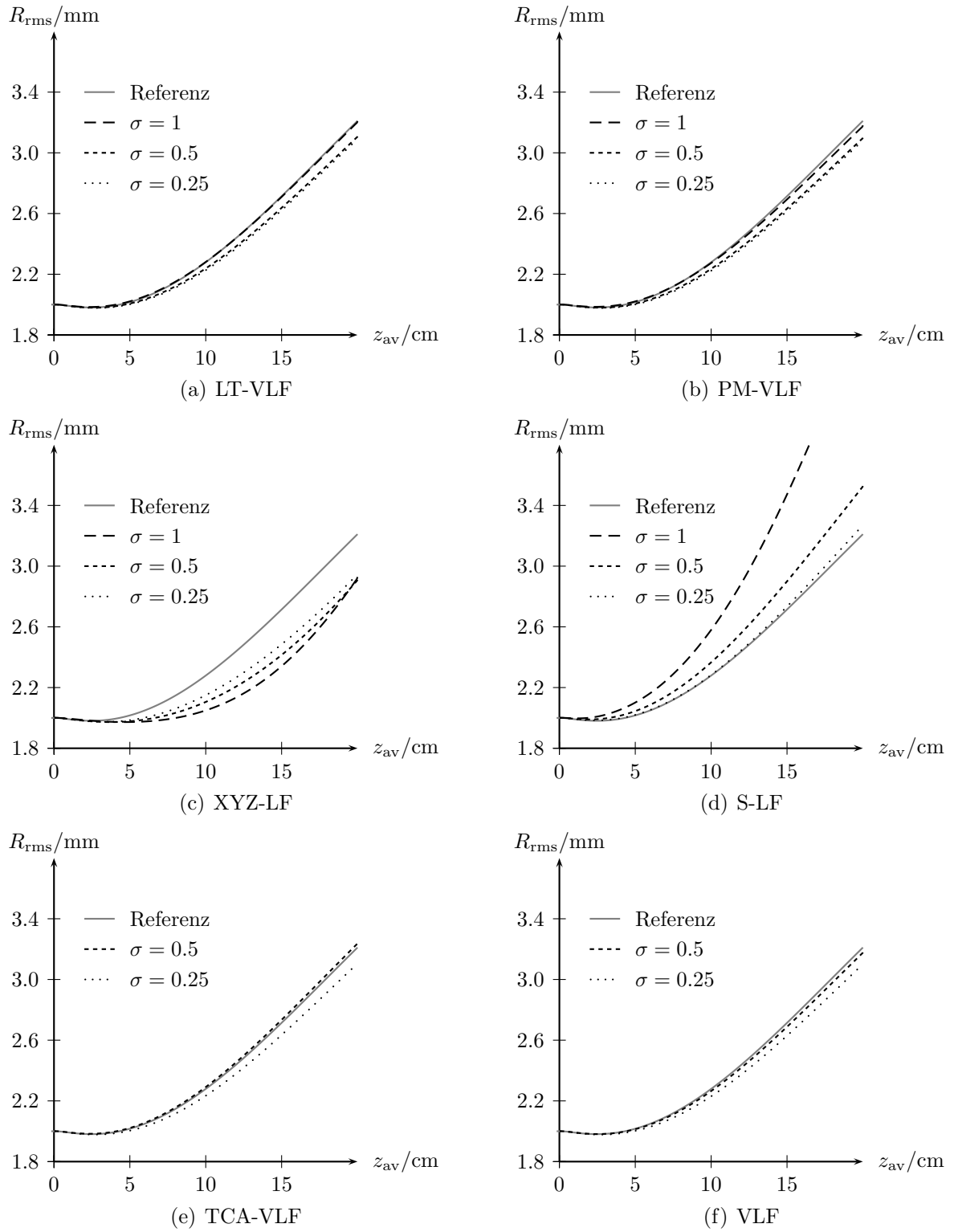
Verglichen mit der Referenzlösung werden zum einen die radiale Komponente der berechneten elektrischen Felder in einem Abstand von  $r = 2\text{mm}$  entlang der z-Achse sowie die normierte Emittanz  $\varepsilon_x$  und der RMS-Radius  $R_{\text{rms}}$  des Bunches. Dies geschieht einerseits bei fixiertem Gitter für verschiedene Courantparameter, um die möglichen Vorteile der Split-Operator-Methoden zu untersuchen und andererseits bei festgehaltenem Courantparameter für verschiedene Gitter, um die Konvergenz der Verfahren zu analysieren. Eine Studie der Konvergenz von teilchenbasierten Verfahren ist schwierig, da die aus den Simulationen gewonnenen Phasenräume miteinander verglichen werden müssen. Dies kann z.B. durch einen Vergleich einer gewissen Anzahl von Momenten der Phasenraumverteilung geschehen. Anstatt eine große Anzahl von Momenten zu vergleichen, wird in dieser Arbeit lediglich die Konvergenz der aus den numerischen Lösungen berechneten Emittanz bezüglich der aus der Referenzlösung bestimmten Emittanz untersucht.

Die Berechnung der Emittanz, Radien und elektrischen Felder erfolgt auf einem homogenen Gitter mit Kantenlänge  $\Delta = 1\text{mm}$ . Für jedes Verfahren werden auf diesem Gitter mit den Zeitschritten, in Einheiten des Courantparameters,  $\sigma = 0.25$ ,  $0.5$  und – falls innerhalb des Stabilitätsbereiches der Methode –  $\sigma = 1.0$  berechnet. Der für die Berechnung der Teilchentrajektorien verwendete Zeitschritt ist dabei konstant gehalten worden, so dass innerhalb eines Zeitschrittes für die Berechnung der Felder mehrere kleine Zeitschritte für die Berechnung der Teilchentrajektorie und

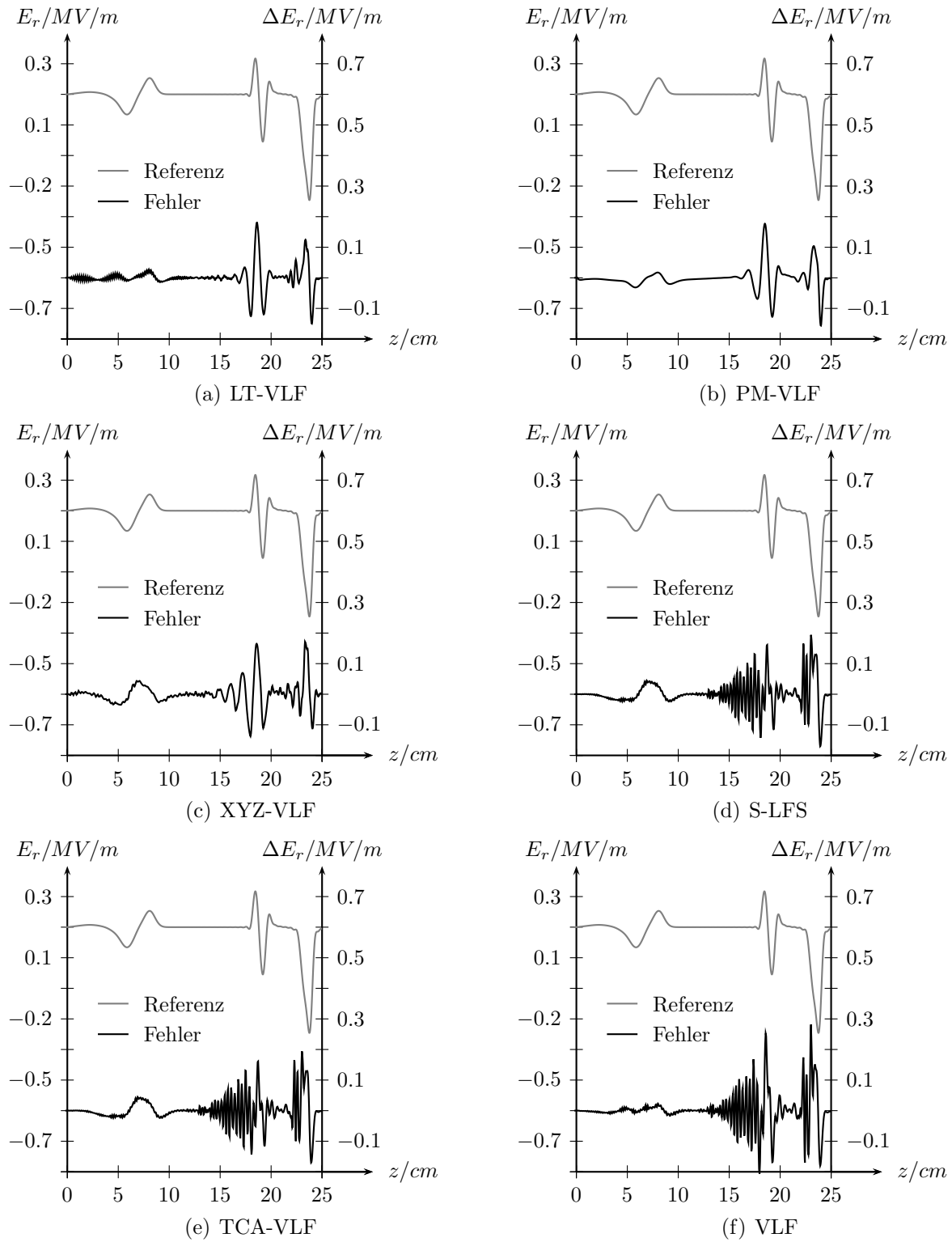




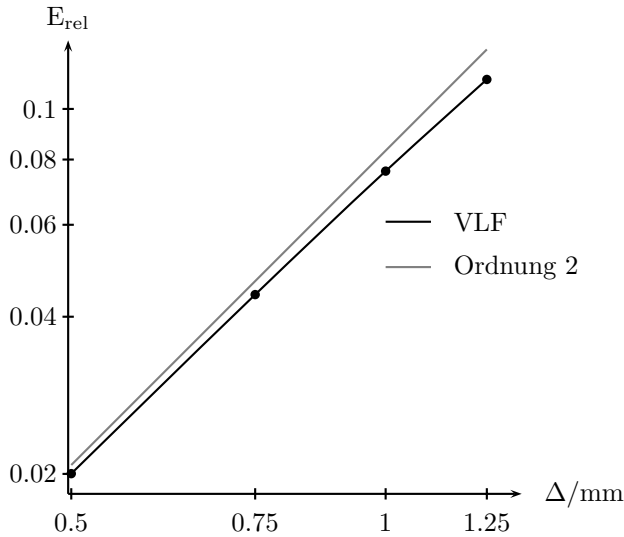
**Abb. 8.4:** Transversale Emittanz  $\varepsilon_x$  als Funktion der z-Komponente  $z_{av}$  des Bunchschwerpunktes für verschiedene Zeitschritte, angegeben in Einheiten des Courantparameters.



**Abb. 8.5:** RMS-Radius  $R_{\text{rms}}$  als Funktion der z-Komponente  $z_{\text{av}}$  des Bunchschwerpunktes für verschiedene Zeitschritte, angegeben in Einheiten des Courantparameters.



**Abb. 8.6:** Fehler der radialen Komponente des elektrischen Feldes  $E_r$  im Abstand von  $R = 2\text{mm}$  entlang der  $z$ -Achse zum Zeitpunkt  $t = 83\text{ns}$ . Zum Vergleich ist die Referenzlösung angegeben.



**Abb. 8.7:** Relativer Fehler in der transversalen Emittanz aufgetragen gegen die Gitterschrittweite  $\Delta$ . Der Courantparameter und die Anzahl von Makroteilchen pro Gitterzelle sind konstant gehalten.

Ströme gemacht werden. Somit hängt die Lösung in erster Näherung nur von den verwendeten Verfahren zur numerischen Integration der Maxwell'schen Gleichungen und der Ankopplung des durch die Teilchen eingeprägten Stromes ab.

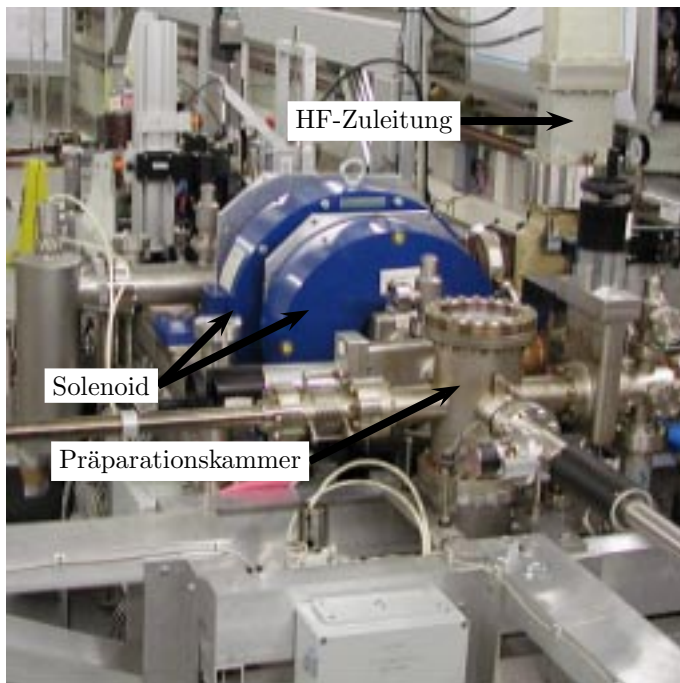
Für jedes Verfahren wird in Abbildung 8.4 die transversale Emittanz  $\varepsilon_x$  und in Abbildung 8.5 der RMS Radius des Bunches gezeigt. Für den Zeitschritt  $\sigma = 0.25$  zeigen alle Verfahren eine deutliche Diskrepanz zur den jeweiligen Referenzlösungen. Die Abweichungen für das XYZ-LF und S-LF Verfahren sind am größten. Für  $\sigma = 0.5$  wird der Fehler für das XYZ-LF und S-LF Verfahren größer und für alle anderen Verfahren kleiner. Als letztes wird der Zeitschritt  $\sigma = 1.0$  betrachtet. Für diesen Zeitschritt sind das VLF und TCA-VLF Verfahren instabil, die Split-Operatormethoden jedoch nicht. Während für das XYZ-LF und S-LF Verfahren der Fehler weiter ansteigt, konvergieren das PM-VLF und LT-VLF Verfahren weiter gegen die Referenzlösung, wobei die Diskrepanz des LT-VLF Verfahren zur Referenzlösung am geringsten ist.

Die Abbildung 8.6 zeigt das radiale elektrische Feld im Abstand von  $R = 2\text{mm}$  von der Strahlachse zum Zeitpunkt  $t = 83\text{ns}$ . Für die Split-Operatormethoden ist dabei der maximal stabile Zeitschritt entsprechend  $\sigma = 1$  und für das VLF und TCA-VLF Verfahren ein Zeitschritt entsprechend  $\sigma = 0.5$  gewählt worden. Allen Split-Operatormethoden ist gemein, das sie im Vergleich zu dem VLF und TCA-VLF Verfahren deutlich weniger durch numerische Dispersionseffekte verursachtes Rauschen zeigen. Die glatteste Lösung wird von dem dissipativen PM-VLF Verfahren geliefert, jedoch unterschreitet sie deutlich den Feldwert am Ende des Bunches. Das dissipative TCA-VLF Verfahren ist zwar in der Lage das Rauschen leicht zu dämpfen, jedoch ist, im Gegensatz zur VLF Methode, eine deutliche Diskrepanz in der Position der Maxima zu erkennen. Im Gegensatz zu diesen beiden Verfahren geben, wie zu erwarten, die nicht dissipativen Verfahren wesentlich besser die Amplitude der Maxima wieder. Von den Split-Operator Methoden gibt die LT-VLF Methode das am nächsten an der Referenzlösung liegende elektrische Feld.

Die Konvergenz der berechneten Emittanz für den Courantparameter  $\sigma = 0.1$  und konstant gehaltener Anzahl von Makroteilchen pro Gitterzelle ist exemplarisch für das VLF-Verfahren in Abb. 8.7 gezeigt. Die Konvergenzordnung entspricht dem theoretisch erwarteten Wert von zwei.

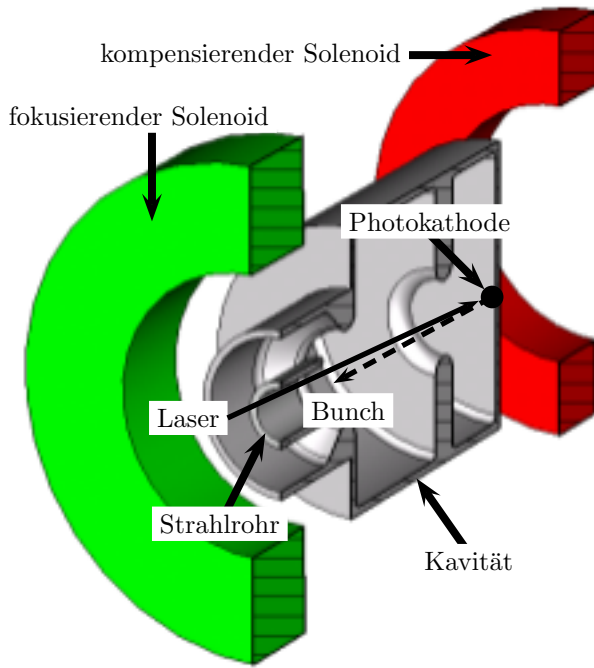
## 9. ANWENDUNG

Als Anwendungsbeispiel dient die in der Photoinjektor-Testanlage am DESY Zeuthen (PITZ) installierte Elektronenkanone (PITZ-Kanone). In modernen Linearbeschleunigern und für Freie Elektronenlasern wird eine hohe Anforderung an die Strahlqualität gestellt. Diese hängt maßgeblich von der Quelle, in diesem Fall der Elektronenkanone, ab. Ein Ziel von PITZ ist es somit, die Strahlqualität und die Betriebsparameter der Kanone für den späteren Einsatz in Linearbeschleunigern und freien Elektronenlasern zu optimieren. Dazu sind neben den Messungen auch Simulationen der Strahlparameter nötig.



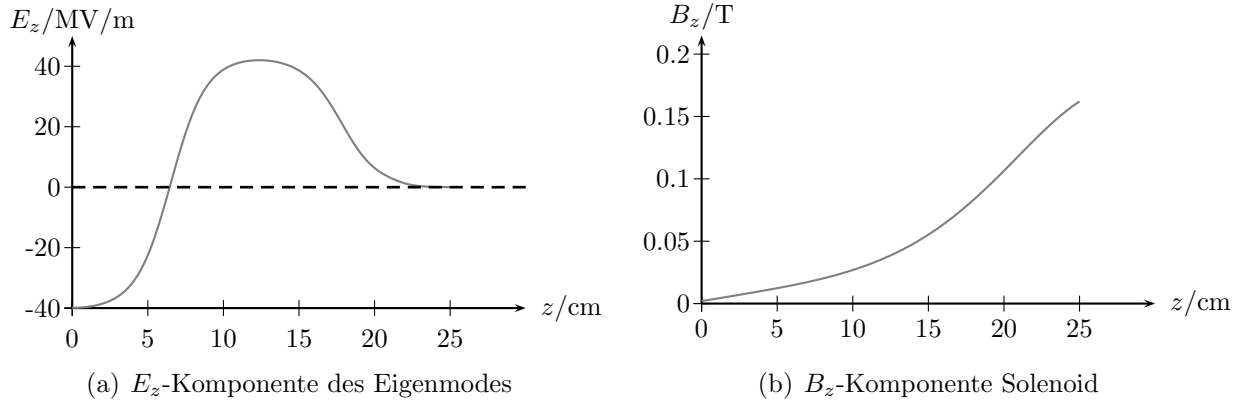
**Abb. 9.1:** Photographie der PITZ-Kanone in DESY Zeuthen. Rechts oben im Bild ist die HF-Zuleitung zu sehen. Die zwei Solenoiden zur Fokussierung des Bunches sind in der Mitte der Abbildung zu erkennen. Der Zylinder rechts der Mitte im Bild ist die Präparationskammer für die Photokathoden.

Bei der PITZ-Kanone handelt es sich um eine Hochfrequenzelektronenkanone, in der die Elektronen durch Photoemission erzeugt werden. Mit einem UV-Laser werden Elektronen aus einer Photokathode herausgelöst. Die Photokathode befindet sich im Inneren eines Hohlraumresonators, dessen Phase so gewählt wird, dass die herausgelösten Elektronen ein beschleunigendes elektrisches Feld sehen. Aufgrund ihrer eigenen Raumladung erfahren die Elektronen eine sie auseinandertreibende Kraft. Um dies teilweise zu kompensieren, wird mit Hilfe der zwei Solenoiden ein fokussierendes Magnetfeld erzeugt.



**Abb. 9.2:** Schematische Darstellung der PITZ-Kanone. Mit einem Laserstrahl werden Elektronen auf einer Photokathode erzeugt. Das elektrische Feld in der Kavität beschleunigt die Elektronen. Aufgrund seiner Raumladungskräfte bläht der Bunch sich auf. Mit Hilfe des durch die beiden Solenoiden erzeugten Magnetfeldes wird der Bunch fokussiert.

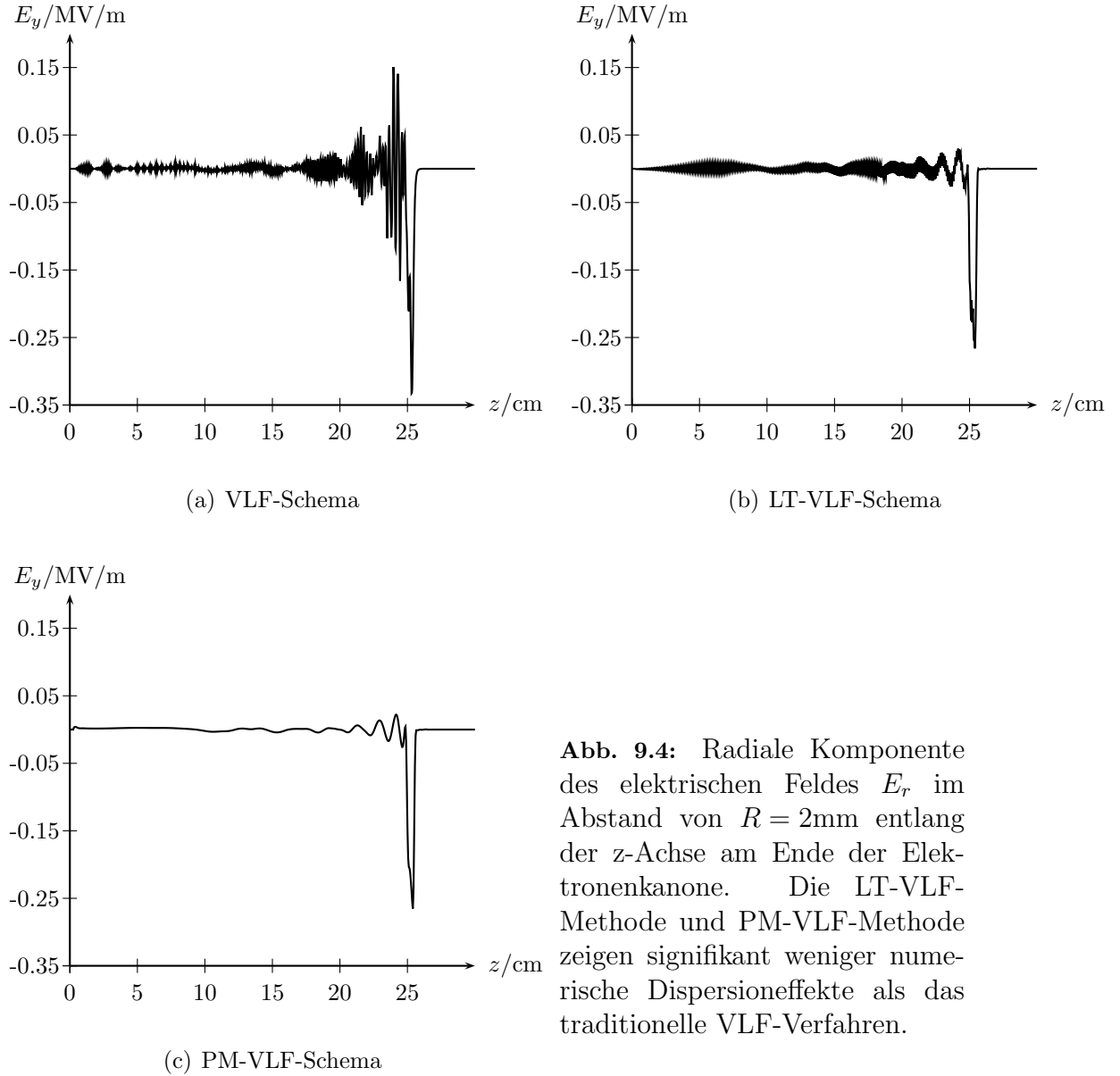
## Simulationen



**Abb. 9.3:** Die linke Abbildung zeigt die  $z$ -Komponente des elektrischen Feldes des beschleunigenden Eigenmode der Kavität auf der Strahlachse. Die rechte Abbildung zeigt die  $z$ -Komponente des durch die beiden Solenoiden erzeugten magnetischen Feldes auf der Strahlachse.

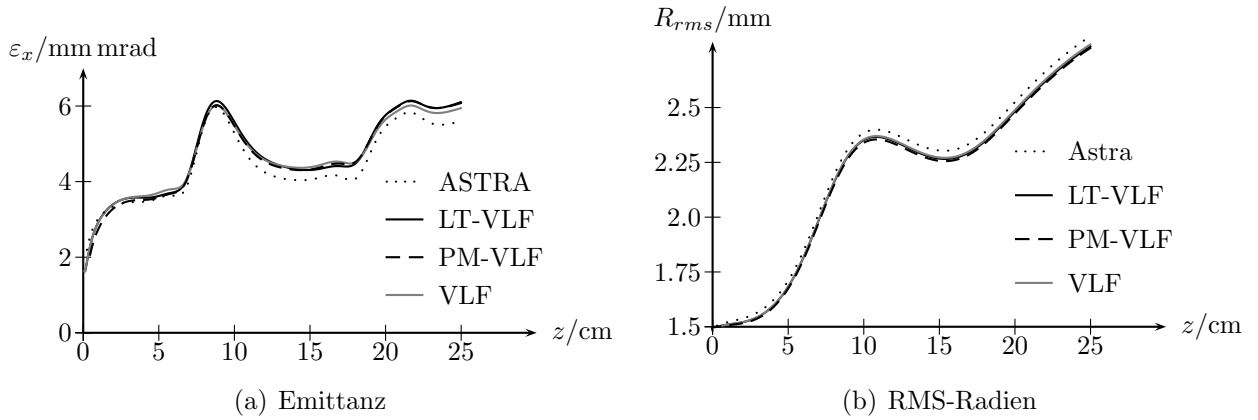
Der in Abbildung 9.3(a) dargestellte Eigenmode der Kavität ist mit dem Programm CST Microwave Studio® [49] und das in Abbildung 9.3(b) dargestellte statische Magnetfeld der Solenoiden mit dem Programm CST EM Studio™ [50] berechnet worden. Die räumliche Diskretisierung für die Raumladungsberechnung ist homogen in longitudinaler Richtung und beträgt  $\Delta = 0.5\text{mm}$ , in transversaler Richtung ist sie homogen mit  $\Delta = 0.5\text{mm}$  in einem rechteckigem Gebiet von 10mm Kantenlänge um

die Strahlachse und steigt dann transversal auf  $\Delta = 5\text{mm}$  an. Als Courantparameter, bezogen auf das homogene longitudinale Gitter, wurde  $\sigma = 1$  für das LT-VLF und  $\sigma = 0.5$  für das VLF Verfahren gewählt.



Der Bunch hat eine Gesamtladung von  $1\text{nC}$  und radial ein gaussförmiges Profil mit einer Standardabweichung von  $\sigma_{rms} = 1.5\text{mm}$  und der Strom entspricht einer Flat-Top-Verteilung mit einer Anstiegszeit von  $2\text{ps}$  und einer FWHM-Zeit von  $20\text{ps}$ , was identisch mit dem Flat-Top-Profil des Validierungsbeispiels (siehe Abb. 8.3(a)) ist. Die Phase des Eigenmodes, bezogen auf den Schwerpunkt des Bunches, ist zu  $\varphi = 38^\circ$  und sein maximales elektrische Feld auf der Achse zu  $42\text{MV/m}$  gewählt.





**Abb. 9.5:** Die linke Grafik zeigt die transversale Emittanz  $\varepsilon_x$ , berechnet mit dem traditionellen VLF-Verfahren und dem neu entwickelten LT-VLF-Verfahren und PM-VLF-Verfahren. Zum Vergleich ist die mit dem ASTRA-Code berechnete Emittanz angegeben. Die rechte Grafik zeigt die berechneten RMS-Radien. Für die VLF- und LT-VLF-Methode sind die RMS-Radien praktisch identisch. Der mit dem PM-VLF Verfahren berechnete RMS-Radius ist immer kleiner als der durch die LT-VLF- und VLF-Verfahren berechnete RMS-Radius. Alle verwendeten Verfahren ergeben einen kleineren RMS-Radius als der ASTRA-Code.

Die maximale magnetische Flussdichte des Solenoiden beträgt  $B_z = 0.17\text{T}$  in einem Abstand von  $z = 0.27\text{m}$  bezüglich der Kathode.

Nach dem der Schwerpunkt des Bunches 250mm zurückgelegt hat, was dem Ausgang der Kanone entspricht, werden die radiale Komponente des elektrischen Feldes und die RMS-Radien sowie die transversalen Emittanzen des Bunches für das LT-VLF-Verfahren und das VLF-Verfahren miteinander und dem ASTRA-Code [51] verglichen. Das mit den Split-Operator-Verfahren berechnete radiale elektrische Feld (siehe Abb. 9.4) zeigt signifikant weniger numerische Dispersionseffekte als das VLF-Verfahren. Insbesondere das PM-VLF-Verfahren produziert im Vergleich zum LT-VLF-Verfahren weniger Rauschen, die Ursache dafür liegt in der dem Verfahren innewohnenden Dissipation für Wellen, die nicht entlang einer der Koordinatenachsen propagieren. Die durch die Verfahren berechneten Emittanzen (siehe Abb. 9.5(a)) und RMS-Radien (siehe Abb. 9.5(b)) sind im wesentlichen identisch, allem Anschein nach macht sich für die berechnete Distanz die höhere Genauigkeit der Split-Operator-Methoden nicht bemerkbar.

# 10. ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK

## 10.1 Zusammenfassung

Im Rahmen der Arbeit wurden Split-Operator-Methoden für die FIT, sowie FVM hinsichtlich ihrer Anwendung in der Beschleunigerphysik untersucht. Motiviert durch die starke Lorentzkontraktion der elektromagnetischen Felder in der Bewegungsrichtungen der Teilchen wurden Split-Operator-Methoden konstruiert, die keinen diskreten Dispersionsfehler entlang dieser Richtung haben. Die konstruierten Verfahren wurden theoretisch untersucht und ihre Dispersionsbeziehungen für einige ausgewählte Richtungen verglichen. Anhand der Eigenmoden eines Rechteckresonators wurden die Verfahren anschließend validiert. Der vollständigen PIC-Algorithmus, in dem die Verfahren eingesetzt wurden, ist für die auf der FIT basierenden Algorithmen numerisch validiert worden. Dazu ist der Drift eines Elektronenbunches berechnet und es sind die Ergebnisse mit dem Programmpaket MAFIA verglichen worden. Die zwei zur Zeit erfolversprechendsten Split-Operator-Verfahren wurden anschließend angewandt, um die PITZ-Elektronenkanone zu simulieren, und die Ergebnisse dem traditionellen Leap-Frog Verfahren gegenübergestellt. Der neu entwickelte LT-VLF Algorithmus hat sich dabei hinsichtlich der Unterdrückung von unphysikalischen Dispersionseffekten als signifikant besser als das traditionelle Leap-Frog-Verfahren erwiesen.

## 10.2 Ausblick

Zum einem ist die Einbindung der FVM in dem vorliegendem PIC-Algorithmus zu vervollständigen. Für die Berechnung von Strahlparameter ist dabei insbesondere eine geeignete Wahl von Strominterpolationsschemen, Feldinterpolationsschemen und der Anbindung des Quellterms zu finden. Ein andere Aspekt ist die Weiterentwicklung der Split-Operator-Algorithmen. Die untersuchten Verfahren haben lediglich für einen Courantparameter  $\sigma = 1$  und ein entlang der Strahlachse homogenes Gittern keine numerische Dispersion. In der Praxis ist ein homogenes Gitter jedoch nicht immer wünschenswert, da z.B. ein geometrisches Detail oder

der Bunch genauer aufgelöst werden soll. Insofern ist es attraktiv, Untergitter und lokale Zeitschritte einzuführen. Dies macht insbesondere die FVM attraktiv, da bei ihnen die Zellen nur über lokale numerische Flüsse gekoppelt sind. Ein Nachteil der vorgestellten Verfahren ist, dass sie für Wellen, die entlang der Gitterdiagonalen propagieren, deutlich schlechter als die traditionellen Verfahren sowie nur von zweiter Ordnung Genauigkeit in Zeit und Raum sind. Folglich erscheint die Entwicklung von Verfahren höherer Ordnung, die entlang der Strahlachse keine Dispersion haben, eine logische Weiterentwicklung.

# ANHANG

# A. MATHEMATIKA NOTEBOOK

## Definition der Matrizen

```
MOne = DiagonalMatrix[{1, 1, 1}]; MatrixForm[MOne];
MZero = DiagonalMatrix[{0, 0, 0}]; MatrixForm[MZero];
CL = {{0, -Pz, 0}, {Pz, 0, 0}, {0, 0, 0}}; MatrixForm[CL];
CLT = {{0, PTz, 0}, {-PTz, 0, 0}, {0, 0, 0}}; MatrixForm[CLT];
AL0 = BlockMatrix[{{MOne, -1/2 σ CL}, {MZero, MOne}}]; MatrixForm[AL0];
AL1 = BlockMatrix[{{MOne, MZero}, {σ CLT, MOne}}]; MatrixForm[AL1];
AL = AL0.AL1.AL0; MatrixForm[AL];
CT = {{0, 0, Py}, {0, 0, -Px}, {-Py, Px, 0}}; MatrixForm[CT];
CTT = {{0, 0, -PTy}, {0, 0, PTx}, {PTy, -PTx, 0}}; MatrixForm[CTT];
AT0 = BlockMatrix[{{MOne, -1/4 σ CT}, {MZero, MOne}}]; MatrixForm[AT0];
AT1 = BlockMatrix[{{MOne, MZero}, {1/2 σ CTT, MOne}}]; MatrixForm[AT1];
AT = AT0.AT1.AT0; MatrixForm[AT];
A = AT.AL.AT; MatrixForm[A];
```

## Berechnung des Charakteristischen Polynoms

```
res1 = CharacteristicPolynomial[A, λ]; res2 = Simplify[res1];
```

Das Charakteristische Polynom hat die Nullstellen  $\lambda_1=1$ ,  $\lambda_2=1$ , die die statischen Moden darstellen, sowie die doppelten Nullstellen des durch den Ausdrucks res3 gegebenen Polynoms, die die propagierende Moden darstellen.

```
res3 = (λ σ4 Px2 PTx2 (-4 + σ2 Pz PTz) - 16 λ σ2 Py PTy (-4 + σ2 Pz PTz) + λ σ4 Py2 PTy2 (-4 + σ2 Pz PTz) + 2 λ σ2 Px PTx (-8 + σ2 Py PTy) (-4 + σ2 Pz PTz) + 64 ((-1 + λ)2 + λ σ2 Pz PTz));
```

## Dispersionsbeziehung - Vereinfachung der zeitlichen Abhängigkeiten

```
res4 = Collect[res3, λ]/.{(64 σ2 Pz PTz + σ4 Px2 PTx2 (-4 + σ2 Pz PTz) - 16 σ2 Py PTy (-4 + σ2 Pz PTz) + σ4 Py2 PTy2 (-4 + σ2 Pz PTz) + 2 σ2 Px PTx (-8 + σ2 Py PTy) (-4 + σ2 Pz PTz)) -> a}
res5 = ComplexExpand[Expand[(res4/.{λ -> exp[I ω]}) exp[-I ω]]];
res6 = Expand[res5/. cos[ω] -> (1 - 2 sin[ω/2]2); 64 + (-128 + a) λ + 64 λ2
```

## Dispersionsbeziehung - Vereinfachung der räumlichen Abhängigkeiten

Abkürzungen : s2x:=sin[ $\frac{\beta_x}{2}$ ], s2y:=sin[ $\frac{\beta_y}{2}$ ], s2z:=sin[ $\frac{\beta_z}{2}$ ]

```
nr1 = (64 σ2 Pz PTz + σ4 Px2 PTx2 (-4 + σ2 Pz PTz) - 16 σ2 Py PTy (-4 + σ2 Pz PTz) + σ4 Py2 PTy2 (-4 + σ2 Pz PTz) + 2 σ2 Px PTx (-8 + σ2 Py PTy) (-4 + σ2 Pz PTz))/
{Px -> (exp[I βx] - 1), Py -> (exp[I βy] - 1), Pz -> (exp[I βz] - 1), PTx -> (exp[-I βx] - 1), PTy -> (exp[-I βy] - 1), PTz -> (exp[-I βz] - 1)};
nr2 = Simplify[ComplexExpand[nr1]];
nr3 = Simplify[nr2/.{sin[βx] -> 2 s2x Sqrt[1 - s2x2], sin[βx] -> (1 - 2 s2x2), sin[βy] -> 2 s2y Sqrt[1 - s2y2], cos[βy] -> (1 - 2 s2y2), sin[βz] -> 2 s2z Sqrt[1 - s2z2], cos[βz] -> (1 - 2 s2z2)};
nr4 = 256 σ2 (s2x2 + s2y2 + s2z2) + Simplify[nr3 - 256 σ2 (s2x2 + s2y2 + s2z2)]
256 (s2x2 + s2y2 + s2z2) σ2 + 64 (s2x2 + s2y2) σ4 (-4 s2z2 + s2x2 (-1 + s2z2 σ2) + s2y2 (-1 + s2z2 σ2))
```

**Dispersionsbeziehung - einsetzen der räumlichen in die zeitliche Abhängigkeit**

$$\text{res6}/.\{a \rightarrow \text{nr4}\} == 0$$

$$256(s2x^2 + s2y^2 + s2z^2)\sigma^2 + 64(s2x^2 + s2y^2)\sigma^4(-4s2z^2 + s2x^2(-1 + s2z^2\sigma^2) + s2y^2(-1 + s2z^2\sigma^2)) - 256\text{Sin}[\frac{\omega}{2}]^2 == 0$$

**Definition der transponierten Matrizen**

```
AL0T = Refine[BlockMatrix[{{MOne, MZero}, {-1/2 σ CLT, MOne}}, σ ∈ Reals]; MatrixForm[AL0T];
AL1T = Refine[BlockMatrix[{{MOne, σ CL}, {MZero, MOne}}, σ ∈ Reals]; MatrixForm[AL1T];
ALT = AL0T. AL1T.AL0T; MatrixForm[ALT];
AT0T = Refine[BlockMatrix[{{MOne, MZero}, {-1/4 σ CTT, MOne}}, σ ∈ Reals]; MatrixForm[AT0T];
AT1T = Refine[BlockMatrix[{{MOne, 1/2 σ CT}, {MZero, MOne}}, σ ∈ Reals]; MatrixForm[AT1T];
ATT = AT0T. AT1T.AT0T; MatrixForm[ATT];
AT = ATT.ALT.ATT; MatrixForm[AT];
M6One = DiagonalMatrix[{1, 1, 1, 1, 1, 1}]; MatrixForm[M6One];
```

**Konstruktion der Divergenzoperatoren**

```
div1 = NullSpace[AT - M6One];
```

```
div2 = Simplify[div1];
```

```
{Se, Sh} = div2;
```

Divergenzoperator für das elektrische Feld

```
Simplify[PzSe]
```

```
{0, 0, 0, -1/4 Px(-4 + σ2PzPTz), -1/4 Py(-4 + σ2PzPTz), Pz}
```

Divergenzoperator für das magnetische Feld

```
Simplify[PTzSh]
```

```
{-1/16 PTx(-16 + σ2PxPTx + σ2PyPTy), -1/16 PTy(-16 + σ2PxPTx + σ2PyPTy), PTz, 0, 0, 0}
```

## B. FINITE VOLUMEN METHODEN

### B.1 Kommutatorbeziehungen

Für  $\alpha \neq \beta$  folgt die Kommutatorbeziehung  $[\mathbf{P}_\alpha, \mathbf{P}_\beta] = 0$  unmittelbar, da per Definition gilt

$$[\mathbf{P}_\alpha, \mathbf{P}_\beta] = \left[ L_\alpha^{-1} \left( \mathbf{1} - \frac{1}{4} D_\alpha^+ D_\alpha^- \right) D_\alpha^o, L_\beta^{-1} \left( \mathbf{1} - \frac{1}{4} D_\beta^+ D_\beta^- \right) D_\beta^o \right] = 0,$$

da ein Produkt von kommutierenden Operatoren ebenfalls kommutiert. Dass die Differenzenoperatoren  $D_\alpha^-$ ,  $D_\beta^o$  und  $D_\gamma^+$  miteinander kommutieren, ist trivial. Somit bleibt zu zeigen, dass

$$[L_\alpha, D_\beta^-] = [L_\alpha, D_\beta^o] = [L_\alpha, D_\beta^+] = 0, \quad \alpha \neq \beta$$

gilt. Dies folgt sofort aus der Tatsache, dass die Länge der jeweiligen x-,y- und z-Kanten in einem kartesischen Gitter sich nur in der x-,y- und z-Richtung ändern.

### B.2 Antisymmetrie der $\mathbf{P}_\alpha$ -Operatoren

Der Beweis, dass die  $\mathbf{P}_\alpha$  bezüglich des Skalarproduktes  $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathbf{V}}$  antisymmetrisch, d.h.  $\mathbf{P}_\alpha^T = -\mathbf{P}_\alpha$  sind, erfolgt wie üblich durch die Definition des transponierten Operators

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{P}_x^T f, g \rangle_{\mathbf{u}} &= \langle f, \mathbf{P}_x g \rangle_{\mathbf{u}} = \left\langle f, \left( \mathbf{1} - \frac{1}{4} D_x^+ D_x^- \right) D_x^o g \right\rangle \\ &= \left\langle D_x^{oT} \left( \mathbf{1} - \frac{1}{4} D_x^+ D_x^- \right)^T f, g \right\rangle = - \left\langle D_x^o \left( \mathbf{1} - \frac{1}{4} D_x^+ D_x^- \right) f, g \right\rangle \\ &= - \left\langle \left( \mathbf{1} - \frac{1}{4} D_x^+ D_x^- \right) D_x^o f, g \right\rangle = \langle -\mathbf{P}_x f, g \rangle_{\mathbf{u}}. \end{aligned}$$

### B.3 Diskrete Energie

Es wird die zeitliche Ableitung der diskreten Energie für den Upwind-Fluss mit homogenen Materialien betrachtet, die Abschätzung für den zentralen Fluss kann

durch die Substitution  $\mathbf{U} \leftarrow 0$  gewonnen werden.

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \mathcal{E}_h &= \left\langle \mathbf{h}, \mathbf{M}_\mu \frac{d}{dt} \mathbf{h} \right\rangle_{\mathbf{u}} + \left\langle \mathbf{e}, \mathbf{M}_\varepsilon \frac{d}{dt} \mathbf{e} \right\rangle_{\mathbf{u}} \\
&= \langle \mathbf{h}, \mathbf{U} \mathbf{h} \rangle_{\mathbf{u}} - \langle \mathbf{h}, \mathbf{C} \mathbf{e} \rangle_{\mathbf{u}} + \langle \mathbf{e}, \mathbf{C} \mathbf{h} \rangle_{\mathbf{u}} + \langle \mathbf{e}, \mathbf{U} \mathbf{h} \rangle_{\mathbf{u}} \\
&= \langle \mathbf{h}, \mathbf{U} \mathbf{h} \rangle_{\mathbf{u}} + \langle \mathbf{e}, \mathbf{U} \mathbf{h} \rangle_{\mathbf{u}} \\
&= \langle h_x, (\mathbf{U}_y + \mathbf{U}_z) h_x \rangle_{\mathbf{u}} + \langle h_y, (\mathbf{U}_x + \mathbf{U}_z) h_y \rangle_{\mathbf{u}} + \langle h_z, (\mathbf{U}_x + \mathbf{U}_y) h_z \rangle_{\mathbf{u}} \\
&\quad + \langle e_x, (\mathbf{U}_y + \mathbf{U}_z) e_x \rangle_{\mathbf{u}} + \langle e_y, (\mathbf{U}_x + \mathbf{U}_z) e_y \rangle_{\mathbf{u}} + \langle e_z, (\mathbf{U}_x + \mathbf{U}_y) e_z \rangle_{\mathbf{u}} \\
&\leq 0
\end{aligned}$$

Die letzte Zeile der Abschätzung folgt daraus, dass die vollständige Auswertung des Skalarproduktes zwölf quadratischen Formen ergibt, von denen jede einzelne negativ-semidefinit ist. Für  $\mathbf{U}_x$  soll dies exemplarisch gezeigt werden.

$$\begin{aligned}
2 \langle h_y, \mathbf{U}_x h_y \rangle_{\mathbf{u}} &= \langle h_y, (D_x^- D_x^+ - D_x^o D_x^o) h_y \rangle \\
&= - \langle D_x^+ h_y, D_x^+ h_y \rangle + \frac{1}{4} \langle (\mathbf{1} + T_x) D_x^+ h_y, (\mathbf{1} + T_x) D_x^+ h_y \rangle \\
&\leq 0.
\end{aligned}$$



# C. ERGÄNZUNGEN ZUR ZEITINTEGRATION

## C.1 Stabilitätskriterien

Der Beweis für die Stabilität eines Verfahrens hängt von dem Auffinden einer geeigneten Norm  $\|\cdot\|_h$  für das Einschrittverfahren ab. Ausgangspunkt einer systematischen Methode zur Konstruktion einer entsprechenden Norm für ein Einschrittverfahren ist die Normalform für 2-Schicht-Verfahren [47]

$$\mathbf{D} \frac{\mathbf{y}^{(n+1)} - \mathbf{y}^{(n)}}{\Delta t} + \mathbf{F} \mathbf{y}^{(n)} = 0. \quad (\text{C.1})$$

Es ist anzumerken, dass die Darstellung der Normalform für 2-Schicht-Verfahren nicht eindeutig ist.

Für eine systematische Untersuchung der Stabilität von energieerhaltenden semidiskreten Verfahren erweist sich das in [34] bewiesene Theorem als nützlich:

**Theorem C.1.1:** *Falls ein 2-Schicht-Verfahren eine Darstellung in der Normalform mit den Eigenschaften*

$$\begin{aligned} \mathbf{Q} &= \mathbf{Q}^T, \\ \mathbf{Q} &> 0, \\ \mathbf{F} &= -\mathbf{F}^T \end{aligned}$$

mit

$$\mathbf{Q} := \mathbf{D} - \frac{\Delta t}{2} \mathbf{F}$$

hat, so gilt in der durch

$$\|u\|_q := \sqrt{\langle u, \mathbf{Q}u \rangle}$$

definierten Norm

$$\|\mathbf{y}^{(n+1)}\|_q = \|\mathbf{y}^{(n)}\|_q$$

und das Verfahren ist somit bezüglich der Norm  $\|\cdot\|_q$  stabil.

## C.2 Zum Verlet-Leap-Frog-Verfahren

Im Gegensatz zum LF-Verfahren erlaubt es das VLF-Verfahren, dass elektromagnetische Feld mit zweiter Ordnung Genauigkeit in der Zeit zu gleichen Zeitpunkten zu berechnen. Im folgendem wird angenommen, dass sich die Systemmatrix als

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{K}_1 \\ \mathbf{K}_2 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{C.2})$$

schreiben lässt und ähnlich zu einer antisymmetrischen Matrix mit einer positiv definiten, symmetrischen Transformationsmatrix

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} \mathbf{B}_1 & 0 \\ 0 & \mathbf{B}_2 \end{pmatrix} \quad (\text{C.3})$$

ist. Das System (C.2) erhält dann die diskrete Energie  $\mathcal{E}_h := \langle \mathbf{y}, \mathbf{B}\mathbf{y} \rangle$ .

Definiert man die beiden Teilsysteme

$$\mathbf{A}_1 = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{K}_1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ und } \mathbf{A}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \mathbf{K}_2 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{C.4})$$

so lässt sich mittels (5.21) die zeitliche Evolution des Systems für einen Zeitschritt  $\Delta t$  als

$$\exp(\mathbf{A}\Delta t) = (1 + \mathbf{A}_1\Delta t/2)(1 + \mathbf{A}_2\Delta t)(1 + \mathbf{A}_1\Delta t/2) + \mathcal{O}(\Delta t^3) \quad (\text{C.5})$$

schreiben. Dabei wurde ausgenutzt, dass die Systemmatrizen der Teilsysteme der algebraischen Identität

$$\mathbf{A}_1^2 = \mathbf{A}_2^2 = 0 \quad (\text{C.6})$$

genügen. Gleichung (C.5) wird als Verlet-Leap-Frog-Methode bezeichnet und hat die Propagationsmatrix

$$\mathbf{G} = (1 + \mathbf{A}_1\Delta t/2)(1 + \mathbf{A}_2\Delta t)(1 + \mathbf{A}_1\Delta t/2). \quad (\text{C.7})$$

Die Stabilität der Methode kann mittels Theorem C.1.1 durch die Einführung der durch die Matrix

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \mathbf{B}_1^2 & 0 \\ 0 & \mathbf{B}_2^2 \left(1 + \frac{\Delta t^2}{4} \mathbf{K}_2 \mathbf{K}_1\right) \end{pmatrix} \quad (\text{C.8})$$

definierten Energie-Norm

$$\mathcal{E}_{ht} := \sqrt{\langle \mathbf{y}, \mathbf{Q}\mathbf{y} \rangle} \quad (\text{C.9})$$

unter der Bedingung

$$1 + \frac{\Delta t^2}{4} \mathbf{K}_2 \mathbf{K}_1 > 0 \quad (\text{C.10})$$

gezeigt werden.

### C.3 Zur Existenz und Konstruktion von erhaltenen Divergenzoperatoren

Es sei das volldiskrete System (5.5) gegeben. Gesucht wird ein diskreter Divergenzoperator  $\tilde{\mathbf{S}}_e$  für die diskrete elektrische Flussdichte  $\hat{\mathbf{d}}$ , der den zwei Bedingungen

$$\mathbf{L}\mathbf{G} = \mathbf{L}, \quad \mathbf{L} = \begin{pmatrix} 0, \tilde{\mathbf{S}}_e \mathbf{M}_\varepsilon \end{pmatrix}, \quad (\text{C.11})$$

$$\left\| \tilde{\mathbf{S}}_e \mathbf{M}_\varepsilon \hat{\mathbf{e}} - \mathbf{q} \right\|_h = \mathcal{O}(\Delta^2) \quad (\text{C.12})$$

genügt.

Die Bedingung (C.11) drückt den Sachverhalt aus, dass der Operator  $\tilde{\mathbf{S}}_e \mathbf{M}_\varepsilon$  von der Propagationsmatrix  $\mathbf{G}$  erhalten wird. Mathematisch bedeutet dies, dass alle Zeilenvektoren von  $\mathbf{L}$  linke Eigenvektoren von  $\mathbf{G}$  zum Eigenwert Eins sein müssen. Die Bedingung (C.12) stellt sicher, dass der Operator  $\tilde{\mathbf{S}}_e \mathbf{M}_\varepsilon$  innerhalb der Verfahrensordnung konsistent mit dem analytischen Divergenzoperator ist.

Um die Bedingung (C.11) kontrollieren zu können, wird die Annahme eines homogenen Gitters, periodischer Materialien und homogener Randbedingungen gemacht. Für die FIT garantieren dies die Eigenschaften

$$[\mathbf{M}_{\mu,r}, \mathbf{P}_s] = 0, \quad r, s \in \{x, y, z\}, \quad (\text{C.13})$$

$$[\mathbf{M}_{\varepsilon,r}, \mathbf{P}_s] = 0, \quad r, s \in \{x, y, z\}, \quad (\text{C.14})$$

welche wiederum die Existenz eines gemeinsamen Eigensystems zusichern und es ermöglichen die Operatoren wie Zahlen zu behandeln. Dies ist äquivalent mit einer Fourieranalyse und reduziert die Matrix  $\mathbf{G}$  auf eine  $6 \times 6$  Matrix, die im folgendem ebenfalls mit  $\mathbf{G}$  bezeichnet wird. Im Unterschied zur Fourieranalyse werden die Operatoren als Symbole beibehalten. Der Untervektorraum der Lösungen von (C.11) kann direkt berechnet werden und hat die Dimension Eins oder Null. Falls er die Dimension Null hat, existiert kein erhaltener diskreter Divergenzoperator. Für den Fall, dass er die Dimension Eins hat, ist der diskrete Divergenzoperator bis auf eine operatorwertige Konstante bestimmt. Sie kann durch Einsetzen des Vektors in die Bedingung (C.12) bis auf Terme  $\mathcal{O}(\Delta^2)$  bestimmt werden.

## C.4 Die Bestimmung des optimalen Stabilisierungsparameters für das stabilisierte Leap-Frog-Verfahren

Um ein Kriterium für die Wahl des Stabilisierungsparameters  $\tau$  des S-LF Verfahrens zu haben, wird eine Fehlerfunktion der Form

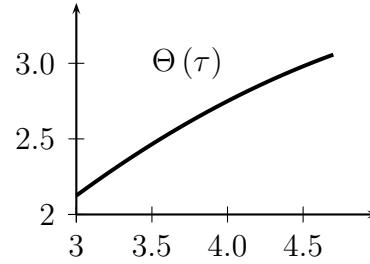
$$\Theta(\tau) := \sqrt{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \left( \sin^2 \left( \frac{\sigma\beta}{2} \right) - K \right)^2 d\varphi d\vartheta d\beta} \quad (\text{C.15})$$

mit

$$K := \sigma^2 K_{LF3} \left( -1 + \frac{\tau}{6} \sigma^2 \left( \sin^2 \left( \frac{k_x \Delta}{2} \right) + \sin^2 \left( \frac{k_y \Delta}{2} \right) \right) \right)^2 \quad (\text{C.16})$$

definiert. Sie stellt ein Maß für den mittleren Phasenfehler nach einem Zeitschritt dar. Der sie innerhalb des Stabilitätsbereiches minimierende Parameter  $\tau$  wird anhand von Abb. C.1 graphisch bestimmt und ergibt sich zu  $\tau = 3$ . Dieser Wert von  $\tau$  entspricht also dem minimalen zur Stabilisierung des Verfahrens nötigen Wert.

**Abb. C.1:** Das Fehlerfunktional  $\Theta$  als Funktion von  $\tau$ ; innerhalb des Stabilitätsbereiches steigt der Fehler streng monoton an.



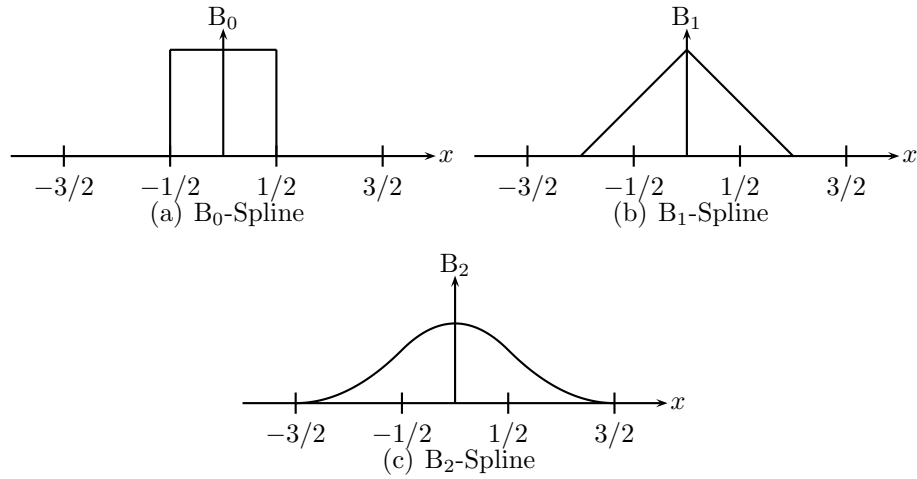
## D. UNIFORME B-SPLINES

Die uniformen B-Splines vom Grad  $k$  sind durch die Rekursion

$$B_0 := \begin{cases} 0 & \text{für } |x| > 1/2 \\ 1 & \text{sonst} \end{cases}, \quad (\text{D.1})$$

$$B_{k+1}(x) := \int_{-\infty}^{\infty} B_0(x - x') B_k(x') dx' \quad (\text{D.2})$$

definiert [52]. Für eine explizite Rekursionsformel und für weitere Identitäten wird der Leser auf [53] verwiesen. Die B-Splines vom Grad 0 bis 2 sind in Abb. D.1 dargestellt. Mit wachsendem Grad des Splines wächst sowohl sein Träger als auch seine Glattheit.



**Abb. D.1:** Uniforme B-Splines vom Grad 0, 1 und 2.

## E. FOURIER-ANALYSE DER TCA-VLF METHODE

Durch eine Fourieranalyse der TCA-VLF Methode erhält man für die Eigenwerte  $\lambda$  der fouriertransformierten Propagationsmatrix  $\mathbf{G}$  das folgende Polynom

$$(1 - \lambda)^2 p^2(\lambda) = 0, \text{ mit } p(\lambda) = a_0 \lambda^2 + a_1 \lambda + a_2 \quad (\text{E.1})$$

mit den Koeffizienten

$$a_0 = 1, \quad a_1 = -(2 + K_{LF3}(1 + \alpha)\sigma^2), \quad a_2 = 1 - K_{LF3}\alpha\sigma^2. \quad (\text{E.2})$$

Das Verfahren ist stabil, solange für alle Eigenwerte  $\lambda$  gilt  $|\lambda| \leq 1$ . Folglich reicht es aus zu zeigen, dass die Nullstellen des Polynoms  $p(\lambda)$  die Bedingung  $|\lambda| \leq 1$  erfüllen. Mit Hilfe des Cohenschen Kriteriums [54] folgt die notwendige und hinreichende Bedingung

$$|a_0| \geq |a_2|, \quad |a_0 + a_2| \geq |a_1|. \quad (\text{E.3})$$

Ein Einsetzen der Ausdrücke liefert die Bedingungen

$$\alpha \geq 0, \quad \alpha \leq \frac{2}{K_{LF3}\sigma^2} - \frac{1}{2}. \quad (\text{E.4})$$

Da gilt  $0 \leq K_{LF3} \leq 12$ , folgt

$$\alpha \geq 0, \quad \alpha \leq \frac{1}{6\sigma^2} - \frac{1}{2} \quad (\text{E.5})$$

als notwendige und hinreichende Bedingung. Der größtmögliche Wert für  $\sigma$  folgt aus der Feststellung, dass der größtmögliche Wert für  $\alpha$  aufgrund der Ungleichung (E.5) streng monoton mit steigendem  $\sigma$  fällt. Aus der Bedingung

$$\alpha = 0 = \frac{2}{6\sigma^2} - \frac{1}{2} \quad (\text{E.6})$$

ergibt sich folglich der größtmögliche Wert von  $\sigma$  zu  $\sigma = 1/\sqrt{3}$ .

Der Amplifizierungsfaktor  $\zeta = |\lambda|$  für propagierende Moden, d.h. solche für die  $\lambda$  einen Imaginärteil ungleich Null hat, berechnet sich aus den Nullstellen des Polynoms  $p(\lambda)$ . Da seine Koeffizienten reell sind, sind seine zwei Nullstellen  $\lambda_1, \lambda_2$  entweder

reell oder komplex konjugiert zueinander und folglich gilt  $|\lambda| = \sqrt{\lambda_1 \lambda_2}$  für propagierende Moden. Die Nullstellen können durch die Standardmethode berechnet werden. Die Einschränkung für die Form des Amplifizierungsfaktors ergibt sich aus der Forderung, dass die Nullstellen einen Imaginärteil ungleich Null haben müssen, damit  $|\lambda| = \sqrt{\lambda_1 \lambda_2}$  gilt.

Für den Fall, dass  $\lambda_1, \lambda_2$  reell sind, gibt es zwei verschiedene Amplifizierungsfaktoren  $\zeta_1 = \lambda_1$  und  $\zeta_2 = \lambda_2$ .

# F. ABKÜRZUNGEN UND SYMBOLE

## Abkürzungsverzeichnis

AF	Amplifizierungsfaktor
FIT	Methode der Finiten Integration
FVM	Finite-Volumen-Methode
FWHM	Halbwertsbreite
LF	Leap-Frog-Zeitintegration
LT-VLF	Split-Operatormethode in longitudinal und transversaler Richtung mit VLF-Zeitintegration für die FIT
LW	Lax-Wendroff-Methode zur Zeitintegration
LW-FVM	LW-Zeitintegration für die Finite-Volumen-Methode
NNPG	Normierte numerische Phasengeschwindigkeit
NPPG	Normierte physikalische Phasengeschwindigkeit
PEC	Perfekter elektrischer Leiter
PIC	Particle-In-Cell
PITZ	Photoinjektor-Testanlage am DESY Zeuthen
PITZ-Kanone	Elektronenkanone
PM-VLF	Split-Operatormethode in Plus und Minus Anteil mit VLF-Zeitintegration für die FIT
RMS	Quadratischer Mittelwerte
S-LF	Stabilisiertes Leap-Frog-Schema für die FIT
TCA-VLF	Transversal Current Adjustment mit VLF-Zeitintegration für die FIT
VLF	Verlet-Leap-Frog-Methode zur Zeitintegration
VLF-ZFV	VLF-Zeitintegration für die FVM mit zentralem Fluss
XYZ-VLF	Split-Operatormethode in drei Raumrichtungen mit VLF-Zeitintegration für die FIT
XYZ-LW-UFV	Split-Operatormethode in drei Raumrichtungen mit LW-Zeitintegration für die FVM mit Upwind-Fluss
GMGI	Gitter-Maxwellgleichungen der FIT
CFD	Computational Fluid Dynamics
PDE	Partielle Differentialgleichung



# Symbolverzeichnis

$\mathbb{N}$	Natürliche Zahlen
$\mathbb{R}$	Reelle Zahlen
$\mathbb{R}_+$	Reelle Zahlen $\geq 0$
$\Omega$	Gebiet
$\partial\Omega$	Rand des Gebietes $\Omega$
$\Gamma$	Gebiet
$\partial\Gamma$	Rand des Gebietes $\Gamma$
$\mathcal{O}, o$	Landau Symbole
$\vec{n}$	Normalenvektor einer Oberfläche
$t$	Zeitvariable
$\vec{x}$	Ortsvariable
$\vec{p}$	Impulsvariable
$\vec{u}$	Dimensionslose Impulsvariable
$\gamma$	Lorentzfaktor
$\beta$	Dimensionslose Geschwindigkeit
$f$	1-Teilchen-Verteilungsfunktion
$q$	Elektrische Ladung
$e$	Elektrische Elementarladung
$\omega$	Kreisfrequenz
$\vec{E}$	Elektrische Feldstärke
$\vec{H}$	Magnetische Feldstärke
$\vec{D}$	Elektrische Flussdichte
$\vec{B}$	Magnetische Flussdichte
$\vec{j}$	Elektrische Stromdichte
$\vec{j}_F$	Elektrische Oberflächenstromdichte
$\varrho$	Elektrische Ladungsdichte
$\varrho_F$	Elektrische Oberflächenladungsdichte
$c_0$	Vakuum-Lichtgeschwindigkeit
$\mu$	Skalare Permeabilität
$\varepsilon$	Skalare Permittivität
$\Delta t$	Zeitschritt
$\vec{e}$	Vektor der diskreten elektrischen Spannungen
$\vec{h}$	Vektor der diskreten magnetischen Spannungen
$\vec{d}$	Vektor der diskreten elektrischen Flüsse
$\vec{b}$	Vektor der diskreten magnetischen Flüsse
$\vec{j}$	Vektor der diskreten elektrischen Ströme
$\mathbf{q}$	Vektor der diskreten elektrischen Ladung

---

$\mathbf{e}$	Vektor der zellgemittelten elektrischen Feldstärke
$\mathbf{h}$	Vektor der zellgemittelten magnetischen Feldstärke
$\mathbf{q}$	Vektor der zellgemittelten elektrischen Ladung
$\mathbf{j}$	Vektor der zellgemittelten elektrischen Stromdichte
$\mathbf{P}_x, \mathbf{P}_y, \mathbf{P}_z$	Differenzenoperator in x-,y- und z-Richtung
$\mathbf{C}, \tilde{\mathbf{C}}$	Primäre / Duale Umlaufmatrix
$\mathbf{S}, \tilde{\mathbf{S}}$	Primäre / Duale Quellmatrix
$\mathbf{M}_\varepsilon$	Diskrete Permittivitätsmatrix
$\mathbf{M}_\mu$	Diskrete Permeabilitätsmatrix
$\mathbf{U}_x, \mathbf{U}_y, \mathbf{U}_z$	Upwinding Matrizen in x-,y- und z-Richtung
$\vec{S}$	Steigungsoperator
$\ \cdot\ _h$	Vom räumlichen Gitter abhängige Norm
$\ \cdot\ _{ht}$	Vom räumlichen und zeitlichem Gitter abhängige Norm

# LITERATURVERZEICHNIS

- [1] E. L. Saladin, E. A. Schneidmiller, M. V. Yurkov, "The Physics of Free Electron Lasers", Springer, Berlin, (1999)
- [2] R. T. Glassey, "The Cauchy Problem In Kinetic Theory", SIAM, Philadelphia, (1996)
- [3] E. M. Lifschitz, L. P. Pitajewski, "Lehrbuch der Theoretischen Physik - Physikalische Kinetik", Akademie Verlag, Berlin, (1990)
- [4] E. Rothwell, M. Cloud, "Electromagnetics", CRC Press LLC, (2001)
- [5] G. F. Carey, "Computational Grids - Generation, Adaptation, and Solution Strategies", Taylor & Francis, (1997)
- [6] R. Schuhmann, "Die nichtorthogonale Finite-Integrations-Methode zur Simulation elektromagnetischer Felder", Dissertation, TU Darmstadt, (1999)
- [7] A. Taflov, "Computational Electrodynamics - The Finite-Difference Time-Domain Method", Artech House, Boston, (1995)
- [8] T. Weiland, et. al. "Elektromagnetisches CAE - Rechnergestützte Methoden zur Berechnung von Feldern", Skriptum zur Vorlesung Feldtheorie II, TU-Darmstadt
- [9] T. Weiland, "A Discretisation Method for the Solution of Maxwell's Equations for Six-Component Fields", Archiv für Elektrotechnik und Übertragungstechnik (AEÜ), Vol. 31, pp. 116-120, (1977)
- [10] T. Weiland, "Time Domain Electromagnetic Field Computation with Finite Difference Methods", Int. J. Num. Mod., Vol. 9, pp. 259-319, (1996)
- [11] T. Weiland, "On the Unique Numerical Solution of Maxwellian Eigenvalue-problems in Three Dimensions", Particle Accelerators, Vol. 17, pp. 227-242, (1985)
- [12] H. Spachmann, "Die Methode der Finiten Integration höherer Ordnung zur numerischen Berechnung elektromagnetischer Felder", Dissertation D17, TU-Darmstadt, (2002)
- [13] R. Schuhmann, T. Weiland, "Conservation of Discrete Energy and Related Laws in the Finite Integration Technique", Progress in Electromagnetics Research, PIER 32, pp. 301-316, (2001)

- [14] M. Clemens, R. Schuhmann, T. Weiland, "Algebraic Properties and Conservation Laws in the Discrete Electromagnetism", FREQUENZ, Band 53, Ausg. 11-12, S. 219 - 225., (1999)
- [15] V. Shankar, W. F. Hall, and A. H. Mohammadian, "A Time-Domain Differential Solver for Electromagnetic Scattering Problems", Proc. of IEEE, Vol. 77, no. 5, pp. 709-721, (1989)
- [16] Culpert B. Laney "Computational Gasdynamics", Cambridge University Press, (1998)
- [17] C. Birdsall and A. Langdon , "Plasma Physics via Computer Simulation", McGraw-Hill, New York, (1985)
- [18] R. W. Hockney, J. W. Eastwood, "Computer Simulation using Particles", IOP Publishing, Bristol, (1988)
- [19] J. Boris, "Proceedings of the Fourth Conference on Numerical Simulation of Plasma", Washington DC, (1970)
- [20] A. Cohen, B. Perthame, "Optimal Approximations of Transport Equations by Particle and Pseudoparticle Methods", Siam J. Math. Anal., Vol. 32, No. 3, pp. 616-636, (2000)
- [21] J. Buon, "Beam phase space and emittance", CERN Accelerator School - Fifth General Accelerator Physics Course, Ed: S. Turner, Vol. I, p. 89, CERN 94 - 01, Geneva, (1994)
- [22] G. Rodrigue, D. White, "A Vector Finite Element Time-Domain Method for Solving Maxwell's Equations On Unstructured Hexahedral Grids", SIAM J. Sci. Comput., Vol. 23, pp. 683-706, (2001)
- [23] E. Hairer, S. P. Norset, G. Wanner, "Solving Ordinary Differential Equations I", Springer, Berlin, (1993)
- [24] L. Lapidus, G. F. Pinder, "Numerical Solution of Partial Differential Equations in Science and Engineering", John Wiley, New York, (1982)
- [25] W. Walter, "Gewöhnliche Differentialgleichungen", Springer-Verlag, Berlin, (1976)
- [26] B. Gustafsson, Heinz-Otto Kreiss, Joseph Oligher, "Time Dependent Problems and Difference Methods", John Wiley & Sons, New York, (1995)
- [27] M. H. Carpenter, D. Gottlieb, S. Abarbanel, "Time-Stable Boundary Conditions for Finite-Difference Schemes Solving Hyperbolic Systems: Methodology and Application to High-Order Compact Schemes", Journal of Comp. Phys. Vol. 111, pp. 220-236, (1994)
- [28] D. W. Zingg, "Aspects of Linear Stability Analysis for Higher-Order Finite-Difference Methods", AIAA Computational Fluid Dynamics Conference, 13th, Snowmass Village, CO, (1997)

- [29] Jan Nordström, Martin Björck, “Finite Volume Approximations and Strict Stability for Hyperbolic Problems”, *Applied Numerical Mathematics*, Vol. 38, pp. 237-255, (2001)
- [30] G. Strang, “On Construction and Comparison of Difference Schemes”, *SIAM J. Num. Anal.*, Vol. 5, pp. 506-517, (1968)
- [31] E. Hairer, C. Lubich, G. Wanner, “Geometric Numerical Integration”, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, (2002)
- [32] B. Fornberg, “Some Numerical Techniques for Maxwell’s Equations in Different Types of Geometries”, *Topics in Computational Wave Propagation, Lecture notes in Computational Science and Engineering*, Vol. 31, pp. 265-299, (2003)
- [33] Wolfram Research, “MATHEMATICA User Guide”, Wolfram Research Inc., Champaign, Illinois, USA
- [34] I. Zagorodnov, Thomas Weiland, “TE/TM Scheme for Computation of Electromagnetic Fields in Accelerators”, *Journal of Comp. Phys.*, Vol. 207, pp. 69-91, (2005)
- [35] F. Edelvik, R. Schuhmann, T. Weiland “A General Stability Analysis of FIT/FDTD Applied to Lossy Dielectrics and Lumped Elements”, *Journal of Numerical Modeling*, Vol. 17, No. 4, pp. 407 - 419, (2004)
- [36] C. Munz, P. Omnes, R. Schneider, E. Sonnendrücker, and U. Voß, “Divergence Correction Techniques for Maxwell Solvers Based on a Hyperbolic Model”, *Journal of Comp. Phys.*, Vol. 161, pp. 484-511, (2000)
- [37] A. B. Langdon, “On Enforcing Gauss’ Law in Electromagnetic Particle-In-Cell Codes”, *Computer Phys. Com.*, Vol. 70, pp. 447-450, (1992)
- [38] A. B. Langdon, “A Method Incorporating Gauß’ Law into Electromagnetic PIC Codes”, *Journal of Comput. Phys.*, Vol. 68, pp. 48-55, (1987)
- [39] D. E. Nielsen and A. T. Drobot, “An Analysis of the Pseudo Current Method”, *J. Comput. Phys.*, Vol. 89, pp. 31-40, (1990)
- [40] T. Z. Esirkepov., “Exact Charge Conservation Scheme for Particle-In-Cell Simulations with an Arbitrary Form-Factor”, *Computer Phys. Com.*, Vol. 135, pp. 144-153, (2001)
- [41] J. Eastwood, “The Virtual Particle Electromagnetic Particle-Mesh Method”, *Computer Phys. Com.*, Vol. 64, pp. 252-266, (1991)
- [42] Joseph O’Rourke, “Computational Geometry in C”, Cambridge University Press, (1998)
- [43] M. Abramowitz, I. A. Stegun, “Handbook of Mathematical Functions”, Dover, New York, (1964)
- [44] J. Villasenor, and O. Buneman, “Rigorous charge conservation for local electromagnetic field solvers”, *Computer Phys. Com.*, Vol. 156, pp. 73-85, (1992)

- [45] T. Umeda, Y. Omura, T. Tominaga, and H. Matsumoto, "A New Charge Conservation Method in Electromagnetic Particle Simulations", Computer Phys. Com., Vol. 156, pp. 73-85, (2003)
- [46] D. V. Gaitonde, J. S. Shang and Jeffrey L. Young, "Practical Aspects of Higher-Order Numerical Schemes for Wave Propagation Phenomena ", International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 45, pp. 1849-1869, (1999)
- [47] A. Samarskij, "Theorie der Differenzenverfahren", Akad. Verlagsges. Geest u. Portig, Leipzig, (1984)
- [48] CST GmbH, "MAFIA User Guide", CST GmbH, Darmstadt, Deutschland
- [49] CST Microwave Studio, "User's Manual", CST GmbH, Darmstadt, Deutschland
- [50] CST EM Studio, "User's Manual", CST GmbH, Darmstadt, Deutschland
- [51] K. Floettmann, "ASTRA User Manual", DESY, Hamburg
- [52] Vichnevetsky, Bowles, "Fourier Analysis of Numerical Approximations of Hyperbolic Equations", SIAM , Philadelphia, (1982)
- [53] Deufelhard, Hohmann, "Numerische Mathematik I - Eine algorithmisch orientierte Einführung", Walter de Gruyter , Berlin, (1993)
- [54] R. Unbehauen, "Systemtheorie 1", R. Oldenbourg Verlag, München, (1997)

## Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei all denen bedanken, ohne die die Anfertigung dieser Arbeit nicht möglich gewesen wäre. Zum einen bei Herrn Prof. Dr.-Ing. Thomas Weiland für die ausgezeichneten Arbeitsmöglichkeiten am Institut und für den Anstoß zu dieser Arbeit. Außerdem bei Herr Dr. Erion Gjonaj für die Durchsicht von Teilen der Arbeit, sowie für die Anregungen und Diskussionen. Bei Herrn Dr.-Ing. Wolfgang Ackermann für die geduldige Beantwortung meiner Fragen zu MAFIA und PITZ und bei Frau Dipl.-Math. Iris Herbst für die Durchsicht meiner Arbeit. Abschließend möchte ich mich bei allen Kollegen und ehemaligen Kollegen für die angenehme Arbeitsatmosphäre bedanken, sowie bei dem Deutschen Elektronen-Synchrotron (DESY) für die finanzielle Unterstützung meiner Arbeit.

Darmstadt, März 2006

# Lebenslauf von Thomas Lau

14.11.1974	Geboren in Burgwedel
1981-1984	Grundschule Obershagen
1984-1987	Orientierungsstufe Uetze
1987-1991	Realschule Uetze
1991-1994	Fachgymnasium Wirtschaft BBS-11 Hannover
1994-2000	Studium der Physik an der Universität Hannover, Abschluss als Diplom-Physiker
seit 2000	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut Theorie Elektromagnetischer Felder des Fachbereiches Elektrotechnik und Informationstechnik der TU-Darmstadt